



PCT

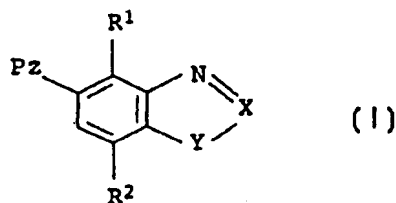
 WELTORGANISATION FÜR GEISTIGES EIGENTUM

 Internationales Büro

 INTERNATIONALE ANMELDUNG VERÖFFENTLICHT NACH DEM VERTRAG ÜBER DIE

 INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES PATENTWESENS (PCT)

<p>(51) Internationale Patentklassifikation 7 : C07D 417/06, 403/06, 413/06, A01N 43/76, 43/78, 43/828, 43/647</p>	A1	<p>(11) Internationale Veröffentlichungsnummer: WO 00/68228</p> <p>(43) Internationales Veröffentlichungsdatum: 16. November 2000 (16.11.00)</p>
<p>(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP00/04040</p> <p>(22) Internationales Anmeldedatum: 5. Mai 2000 (05.05.00)</p> <p>(30) Prioritätsdaten: 199 21 240.6 7. Mai 1999 (07.05.99) DE</p> <p>(71) Anmelder (für alle Bestimmungsstaaten ausser US): BASF AKTIENGESELLSCHAFT [DE/DE]; D-67056 Ludwigshafen (DE).</p> <p>(72) Erfinder; und (75) Erfinder/Anmelder (nur für US): MAYER, Guido [DE/DE]; Gutleuthausstrasse 8, D-67433 Neustadt (DE). BAUMANN, Ernst [DE/DE]; Falkenstrasse 6a, D-67373 Dudenhofen (DE). DEYN, Wolfgang von [DE/DE]; An der Bleiche 24, D-67435 Neustadt (DE). KUDIS, Steffen [DE/DE]; Spelzenstrasse 10, D-68167 Mannheim (DE). LANGEMANN, Klaus [DE/DE]; Goldbergstrasse 18, D-67551 Worms (DE). MISSLITZ, Ulf [DE/DE]; Mandelring 74, D-67433 Neustadt (DE). NEIDLEIN, Ulf [DE/DE]; Brahmsstrasse 3, D-68165 Mannheim (DE). WITSCHHEL, Matthias [DE/DE]; Wittelsbachstrasse 81, D-67061 Ludwigshafen (DE). RACK, Michael [DE/DE]; Sandwingert 67, D-69123 Heidelberg (DE). VOLK, Thorsten [DE/DE]; Strassburger Ring 16-18, D-68229</p>	<p>Mannheim (DE). OTTEN, Martina [DE/DE]; Gunterstrasse 28, D-67069 Ludwigshafen (DE). WESTPHALEN, Karl-Otto [DE/DE]; Zum Pfauenturm 17, D-67346 Speyer (DE). WALTER, Helmut [DE/DE]; Grünstadter Strasse 82, D-67283 Obrigheim (DE).</p> <p>(74) Anwälte: KINZEBACH, Werner usw.; Ludwigsplatz 4, D-67059 Ludwigshafen (DE).</p> <p>(81) Bestimmungsstaaten: AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BY, CA, CH, CN, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EE, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, NO, NZ, PL, PT, RO, RU, SD, SE, SG, SI, SK, SL, TJ, TM, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VN, YU, ZA, ZW, ARIPO Patent (GH, GM, KE, LS, MW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZW), eurasisches Patent (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), europäisches Patent (AT, BE, CH, CY, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE), OAPI Patent (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).</p> <p>Veröffentlicht <i>Mit internationalem Recherchenbericht.</i></p>	
<p>(54) Title: 4-(3',4'-HETEROCYCLYL BENZOYL) PYRAZOLES AS HERBICIDAL AGENTS</p> <p>(54) Bezeichnung: 4-(3',4'-HETEROCYCLYLBENZOYL) PYRAZOLE ALS HERBIZIDE</p> <p>(57) Abstract</p> <p>The invention relates to pyrazolyl derivatives of benzo-condensated, unsaturated 5-membered nitrogen heterocycles of the general formula (I), wherein X represents N or a group C-R³; Y is O, S, SO, SO₂ or NR⁴ or X-Y is S=N, and wherein X means sulfur; and the variables R¹, R² and Pz have the meanings indicated in claim 1. The invention further relates to a method of producing said compounds, to agents that contain them and to their use as herbicidal agents.</p> <p>(57) Zusammenfassung</p> <p>Die vorliegende Erfindung betrifft Pyrazolyl-Derivate benzokondensierter, ungesättigter 5-Ring-Stickstoffheterocyclen der allgemeinen Formel (I), worin X für N oder eine Gruppe C-R³ steht; Y für O, S, SO, SO₂ oder NR⁴ steht oder X-Y für S=N stehen, und X Schwefel bedeutet; und die Variablen R¹, R² und Pz die in Anspruch 1 angegebenen Bedeutungen aufweisen. Die vorliegende Verbindung betrifft weiterhin ein Verfahren zur Herstellung dieser Verbindungen, Mittel, die diese Verbindungen enthalten, und ihre Verwendung als Herbizide.</p>		



LEDIGLICH ZUR INFORMATION

Codes zur Identifizierung von PCT-Vertragsstaaten auf den Kopfbögen der Schriften, die internationale Anmeldungen gemäss dem PCT veröffentlichen.

AL	Albanien	ES	Spanien	LS	Lesotho	SI	Slowenien
AM	Armenien	FI	Finnland	LT	Litauen	SK	Slowakei
AT	Österreich	FR	Frankreich	LU	Luxemburg	SN	Senegal
AU	Australien	GA	Gabun	LV	Letland	SZ	Swasiland
AZ	Aserbaidschan	GB	Vereinigtes Königreich	MC	Monaco	TD	Tschad
BA	Bosnien-Herzegowina	GE	Georgien	MD	Republik Moldau	TG	Togo
BB	Barbados	GH	Ghana	MG	Madagaskar	TJ	Tadschikistan
BE	Belgien	GN	Guinea	MK	Die ehemalige jugoslawische Republik Mazedonien	TM	Turkmenistan
BF	Burkina Faso	GR	Griechenland			TR	Türkei
BG	Bulgarien	HU	Ungarn	ML	Mali	TT	Trinidad und Tobago
BJ	Benin	IE	Irland	MN	Mongolei	UA	Ukraine
BR	Brasilien	IL	Israel	MR	Mauretanien	UG	Uganda
BY	Belarus	IS	Island	MW	Malawi	US	Vereinigte Staaten von Amerika
CA	Kanada	IT	Italien	MX	Mexiko	UZ	Usbekistan
CF	Zentralafrikanische Republik	JP	Japan	NE	Niger	VN	Vietnam
CG	Kongo	KE	Kenia	NL	Niederlande	YU	Jugoslawien
CH	Schweiz	KG	Kirgisistan	NO	Norwegen	ZW	Zimbabwe
CI	Côte d'Ivoire	KP	Demokratische Volksrepublik Korea	NZ	Neuseeland		
CM	Kamerun			PL	Polen		
CN	China	KR	Republik Korea	PT	Portugal		
CU	Kuba	KZ	Kasachstan	RO	Rumänien		
CZ	Tschechische Republik	LC	St. Lucia	RU	Russische Föderation		
DE	Deutschland	LI	Liechtenstein	SD	Sudan		
DK	Dänemark	LK	Sri Lanka	SE	Schweden		
EE	Estland	LR	Liberia	SG	Singapur		

4-(3', 4'-HETEROCYCLYL BENZOYL) PYRAZOLE ALS HERBIZIDE

5 Beschreibung

Die vorliegende Erfindung betrifft Pyrazolyl-Derivate benzokondensierter, ungesättigter 5-Ring-Stickstoffheterocyclen, Verfahren zur Herstellung derartiger Pyrazolyl-Derivate, Mittel, die
10 derartige Verbindungen enthalten, sowie die Verwendung der Pyrazolyl-Derivate oder Mittel, die diese enthalten, zur Schadpflanzenebekämpfung.

Aus der WO 96/05197 sind Saccharin-Derivate mit herbizider Wirkung bekannt, die am Benzolkern des Saccharingerüsts mit einem
15 (5-Hydroxy-pyrazol-4-yl)carbonyl-Rest substituiert sind. Die WO 97/30993 und die WO 97/09327 beschreiben Dioxothiochroman-Derivate und Dihydrobenzothiophen-Derivate mit herbizider Wirkung, die ebenfalls am Benzolkern der Schwefel-Heterocyclen einen
20 (5-Hydroxypyrazol-4-yl)carbonyl-Rest aufweisen.

Aus der WO 97/08164 sind unter anderem benzkondensierte Derivate des γ -Butyrolactams mit herbizider Wirkung bekannt, die ebenfalls einen (5-Hydroxypyrazol-4-yl)carbonyl-Rest aufweisen.

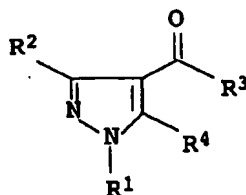
25

Die herbiziden Eigenschaften der aus den genannten Druckschriften bekannten Verbindungen sowie deren Verträglichkeiten gegenüber Kulturpflanzen vermögen jedoch nur bedingt die Anforderungen an Herbizide zu befriedigen.

30

Die EP-A-822 187 beschreibt Herbizide auf der Basis arylsubstituierter Pyrazole der allgemeinen Formel

35



40

worin R¹ für Wasserstoff oder eine für ein Pestizid geeignete
45 Schutzgruppe steht, R⁴ vorzugsweise Wasserstoff bedeutet und R² sowie R³ für Phenyl, Naphthyl oder heterocyclische Gruppen stehen, die gegebenenfalls substituiert sein können. R³ steht vorzugsweise

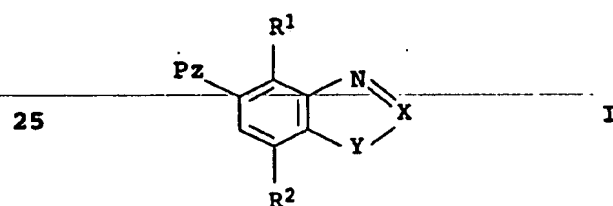
2

für einen 5- oder 6-gliedrigen heterocyclischen Ring und insbesondere für eine Thiophengruppe. Die herbizide Wirkung der in dieser Schrift beschriebenen Verbindungen sowie ihre Verträglichkeit gegenüber Nutzpflanzen ist ebenfalls nicht zufriedenstellend.

Der vorliegenden Erfindung liegt somit die Aufgabe zugrunde neue Verbindungen mit herbizider Wirkung bereitzustellen, die vorzugsweise eine höhere Wirksamkeit als die herbiziden Substanzen des Standes der Technik und/oder eine bessere Selektivität gegenüber Schadpflanzen aufweisen.

Es wurde nun überraschenderweise gefunden, dass diese Aufgabe durch Pyrazolyl-Derivate benzokondensierter, ungesättigter 5-Ring-Stickstoffheterocyclen der nachstehend definierten, allgemeinen Formel I gelöst wird.

Demnach betrifft die vorliegende Erfindung Pyrazolyl-Derivate benzokondensierter, ungesättigter 5-Ring-Stickstoffheterocyclen der allgemeinen Formel I,



30

worin

X für N oder eine Gruppe C-R³ steht;

35 Y für O, S, SO, SO₂ oder NR⁴ steht;

oder

X-Y für S=N stehen, und X Schwefel bedeutet;

40

R¹ Wasserstoff, Nitro, Halogen, Cyano, C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Halogenalkoxy, C₁-C₆-Alkylthio, C₁-C₆-Halogenalkylthio, C₁-C₆-Alkylsulfinyl, C₁-C₆-Halogenalkylsulfinyl, C₁-C₆-Alkylsulfonyl, C₁-C₆-Halogenalkylsulfonyl, Aminosulfonyl, C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-alkyl, C₁-C₆-Alkylthio-C₁-C₆-alkyl,

45

3

C₁-C₆-Alkylsulfinyl-C₁-C₆-alkyl,
 C₁-C₆-Alkylsulfonyl-C₁-C₆-alkyl,
 C₁-C₆-Alkylamino-C₁-C₆-alkyl, oder
 Di-(C₁-C₆-alkyl)amino-C₁-C₆-alkyl;

5

R² Wasserstoff, Halogen oder C₁-C₆-Alkyl;

R³ Wasserstoff, Halogen, Nitro, Cyano, Hydroxy, Amino,
 Mercapto, Rhodano, Hydrazid, C₁-C₆-Alkyl,

10

C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Hydroxyalkyl, C₁-C₆-Aminoalkyl,
 C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-alkyl, C₁-C₆-Alkylcarbonyl-C₁-C₆-alkyl,
 C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Halogenalkoxy, C₁-C₆-Hydroxyalkoxy,
 C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-alkoxy, C₃-C₆-Cycloalkyl,

15

C₁-C₆-Alkylamino, Di-C₁-C₆-alkylamino,
 C₃-C₆-Cycloalkylamino, wobei die Alkyl- und
 Cycloalkylgruppen der drei letztgenannten Reste teilweise
 oder vollständig halogeniert und/oder ein, zwei oder drei
 Substituenten, ausgewählt unter C₁-C₄-Alkoxy oder Hydroxy
 tragen können,

20

C₁-C₆-Alkylthio, C₁-C₆-Halogenalkylthio,
 C₁-C₆-Hydroxyalkylthio, C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-alkylthio,
 C₁-C₆-Alkylsulfinyl, C₁-C₆-Alkylsulfonyl,

25

Phenyl, Naphthyl, Heterocyclyl, Phenylamino, Phenoxy,
 Diphenylamino, wobei die Phenyl- und Heterocyclylgruppen
 der sechs letztgenannten Reste ihrerseits partiell oder
 vollständig halogeniert und/oder einen, zwei oder drei
 Substituenten, ausgewählt unter Nitro, Cyano, Hydroxy,
 C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy und
 C₁-C₄-Halogenalkoxy, tragen können,

30

C(O)OR⁵, oder C(O)N(R⁶)R⁷;

35

R⁴ Wasserstoff, C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl,
 C₁-C₆-Hydroxyalkyl, C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-alkyl,

40

Phenyl, Naphthyl, wobei die zwei letztgenannten Reste
 ihrerseits partiell oder vollständig halogeniert und/oder
 einen, zwei oder drei Substituenten, ausgewählt unter
 Nitro, Cyano, Hydroxy, C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl,
 C₁-C₄-Alkoxy und C₁-C₄-Halogenalkoxy, tragen können;
 bedeuten, wobei

45

4

R⁵ für Wasserstoff, C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl,
C₁-C₆-Hydroxyalkyl, C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-alkyl,

5 Phenyl, Naphthyl oder Heterocyclyl steht, wobei die drei
letztgenannten Reste ihrerseits partiell oder vollständig
halogeniert und/oder einen, zwei oder drei Substituenten,
ausgewählt unter Nitro, Cyano, Hydroxy, C₁-C₄-Alkyl,
C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy und C₁-C₄-Halogenalkoxy,
tragen können; und

10

R⁶, R⁷ unabhängig voneinander für Wasserstoff, C₁-C₆-Alkyl,
C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Hydroxyalkyl,
C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-alkyl,

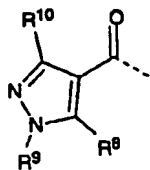
15

Phenyl oder Naphthyl stehen, wobei die zwei
letztgenannten Reste ihrerseits partiell oder vollständig
halogeniert und/oder einen, zwei oder drei Substituenten,
ausgewählt unter Nitro, Cyano, Hydroxy, C₁-C₄-Alkyl,
C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy und C₁-C₄-Halogenalkoxy,
tragen können;

20

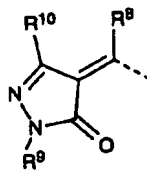
und P₂ für einen Rest der Formel IIa oder IIb steht,

25



30

IIa



IIb

worin die Variablen R⁸, R⁹ und R¹⁰ folgende Bedeutung haben:

35

R⁸ Hydroxy, Mercapto, Halogen, OR¹¹, SR¹¹, SOR¹², SO₂R¹²,
OSO₂R¹², P(O)R¹³R¹⁴, OP(O)R¹³R¹⁴, P(S)R¹³R¹⁴, OP(S)R¹³R¹⁴,
NR¹⁵R¹⁶, ONR¹⁵R¹⁶ oder N-gebundenes Heterocyclyl, das
partiell oder vollständig halogeniert sein kann
und/oder einen, zwei oder drei der folgenden Reste
tragen kann: Nitro, Cyano, C₁-C₄-Alkyl,
40 C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy oder
C₁-C₄-Halogenalkoxy;

45

R⁹ Wasserstoff, C₁-C₆-Alkyl, C₃-C₆-Cycloalkyl,
C₁-C₆-Halogenalkyl, Hydroxy, C₁-C₆-Alkoxy oder
C₁-C₆-Halogenalkoxy;

5

- R¹⁰ Wasserstoff, Halogen, C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl, Hydroxy, C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Halogenalkoxy, C₁-C₆-Alkylthio oder C₁-C₆-Halogenalkylthio;
- 5 R¹¹ C₁-C₆-Alkyl, C₃-C₆-Alkenyl, C₃-C₆-Halogenalkenyl, C₃-C₆-Alkinyl, C₃-C₆-Halogenalkinyl, C₃-C₆-Cycloalkyl, C₁-C₆-Alkylcarbonyl, C₂-C₆-Alkenylcarbonyl, C₂-C₆-Alkinylcarbonyl, C₃-C₆-Cycloalkylcarbonyl, C₁-C₆-Alkoxycarbonyl, C₃-C₆-Alkenyloxy carbonyl, C₃-C₆-Alkinyloxy carbonyl, C₁-C₆-Alkylthiocarbonyl, C₁-C₆-Alkylaminocarbonyl, C₃-C₆-Alkenylaminocarbonyl, C₃-C₆-Alkinylaminocarbonyl, N,N-Di-(C₁-C₆-alkyl)-aminocarbonyl, N-(C₃-C₆-Alkenyl)-N-(C₁-C₆-alkyl)-aminocarbonyl, N-(C₃-C₆-Alkinyl)-N-(C₁-C₆-alkyl)-aminocarbonyl, N-(C₁-C₆-Alkoxy)-N-(C₁-C₆-alkyl)-aminocarbonyl, N-(C₃-C₆-Alkenyl)-N-(C₁-C₆-alkoxy)-aminocarbonyl, N-(C₃-C₆-Alkinyl)-N-(C₁-C₆-alkoxy)-aminocarbonyl, Di-(C₁-C₆-alkyl)-aminothiocarbonyl oder C₁-C₆-Alkoxyimino-C₁-C₆-alkyl, wobei die genannten Alkyl-, Cycloalkyl- und Alkoxyreste partiell oder vollständig halogeniert sein können und/oder eine, zwei oder drei der folgenden Gruppen tragen können: Cyano, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, Di-(C₁-C₄-alkyl)-amino, C₁-C₄-Alkylcarbonyl, C₁-C₄-Alkoxy carbonyl, C₁-C₄-Alkoxy-C₁-C₄-alkoxy carbonyl, C₁-C₄-Alkylaminocarbonyl, Di-(C₁-C₄-alkyl)-aminocarbonyl, Aminocarbonyl, C₁-C₄-Alkylcarbonyloxy oder C₃-C₆-Cycloalkyl;
- 10 20 25 30 35 40 45
- Phenyl, Phenyl-C₁-C₆-alkyl, Phenylcarbonyl-C₁-C₆-alkyl, Phenylcarbonyl, Phenoxycarbonyl, Phenyloxythiocarbonyl, Phenylaminocarbonyl, N-(C₁-C₆-Alkyl)-N-(phenyl)-aminocarbonyl, Phenyl-C₂-C₆-alkenylcarbonyl, Heterocyclyl, Heterocyclyl-C₁-C₆-alkyl, Heterocyclylcarbonyl-C₁-C₆-alkyl, Heterocyclylcarbonyl, Heterocycliloxy carbonyl, Heterocycliloxythiocarbonyl, Heterocyclylaminocarbonyl, N-(C₁-C₆-Alkyl)-N-(heterocyclyl)-aminocarbonyl, oder Heterocyclyl-C₂-C₆-alkenylcarbonyl, wobei der Phenyl- und der Heterocyclyl-Rest der 18 letztgenannten Substituenten partiell oder vollständig halogeniert sein kann und/oder einen, zwei oder drei der folgenden Reste tragen kann: Nitro, Cyano, C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy oder

6

C₁-C₄-Halogenalkoxy;

- 5 R¹² C₁-C₆-Alkyl, C₃-C₆-Alkenyl, C₃-C₆-Alkinyl oder
C₃-C₆-Cycloalkyl, wobei die vier genannten Reste
partiell oder vollständig halogeniert sein können
und/oder eine, zwei oder drei der folgenden Gruppen
tragen können: Cyano, C₁-C₄-Alkoxy,
C₁-C₄-Halogenalkoxy, C₁-C₄-Alkylthio,
C₁-C₄-Halogenalkylthio, C₁-C₄-Alkylcarbonyl,
10 C₁-C₄-Alkoxycarbonyl oder C₁-C₄-Halogenalkoxycarbonyl;
-
- 15 Phenyl, Phenyl-C₁-C₆-alkyl, Heterocyclyl oder
Heterocyclyl-C₁-C₆-alkyl, wobei der Phenyl- und der
Heterocyclyl-Rest der letztgenannten Substituenten
partiell oder vollständig halogeniert sein kann
und/oder einen, zwei oder drei der folgenden Reste
tragen kann: Nitro, Cyano, C₁-C₄-Alkyl,
C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkoxy
oder C₁-C₄-Alkoxycarbonyl;
- 20 R¹³, R¹⁴ unabhängig voneinander Wasserstoff, Hydroxy,
C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Alkylthio, Phenyl,
Phenyl-C₁-C₄-alkyl oder Phenoxy, wobei die drei
25 letztgenannten Substituenten partiell oder vollständig
halogeniert sein können und/oder einen, zwei oder drei
der folgenden Reste tragen können: Nitro, Cyano,
C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy,
C₁-C₄-Halogenalkoxy oder C₁-C₄-Alkoxycarbonyl;
- 30 R¹⁵ Wasserstoff, C₁-C₆-Alkyl, C₃-C₆-Alkenyl,
C₃-C₆-Halogenalkenyl, C₃-C₆-Alkinyl,
C₃-C₆-Halogenalkinyl, C₃-C₆-Cycloalkyl,
C₁-C₆-Alkylcarbonyl, Hydroxy, C₁-C₆-Alkoxy,
C₃-C₆-Alkenyloxy, C₃-C₆-Alkinyloxy, Amino,
35 C₁-C₆-Alkylamino, Di-(C₁-C₆-alkyl)-amino oder
C₁-C₆-Alkylcarbonylamino, wobei die genannten Alkyl-,
Cycloalkyl- und Alkoxyreste partiell oder vollständig
halogeniert sein können und/oder einen, zwei oder drei
40 Reste der folgenden Gruppe tragen können: Cyano,
C₁-C₄-Alkoxycarbonyl, C₁-C₄-Alkylaminocarbonyl,
Di-(C₁-C₄-alkyl)-aminocarbonyl oder C₃-C₆-Cycloalkyl;
- 45 Phenyl, Phenyl-C₁-C₄-alkyl, Phenylcarbonyl,
Heterocyclyl, Heterocyclyl-C₁-C₄-alkyl oder
Heterocyclylcarbonyl, wobei der Phenyl- oder
Heterocyclyl-Rest der sechs letztgenannten
Substituenten partiell oder vollständig halogeniert

7

sein kann und/oder einen, zwei oder drei der folgenden Reste tragen kann: Nitro, Cyano, C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy oder C₁-C₄-Halogenalkoxy; und

5

R¹⁶ Wasserstoff, C₁-C₆-Alkyl oder C₃-C₆-Alkenyl, C₃-C₆-Alkynyl; bedeutet,

sowie deren landwirtschaftlichen brauchbaren Salze.

10

Ferner wurden herbizide Mittel gefunden, die Pyrazolyl-Derivate der Formel I enthalten und eine sehr gute herbizide Wirkung besitzen. Außerdem wurden Verfahren zur Herstellung dieser Mittel und Verfahren zur Bekämpfung von unerwünschtem Pflanzenwuchs mit den Pyrazolylderivaten der Formel I gefunden.

Die Verbindungen der Formel I können je nach Substitutionsmuster ein oder mehrere Chiralitätszentren enthalten und liegen dann als Enantiomeren oder Diastereomeregemische vor. Gegenstand der Erfindung sind sowohl die reinen Enantiomeren oder Diastereomeren als auch deren Gemische.

Die Verbindungen der Formel I können auch in Form ihrer landwirtschaftlich brauchbaren Salze vorliegen, wobei es auf die Art des Salzes in der Regel nicht ankommt. Im allgemeinen kommen die Salze derjenigen Kationen oder die Säureadditionssalze derjenigen Säuren in Betracht, deren Kationen, beziehungsweise Anionen, die herbizide Wirkung der Verbindungen I nicht negativ beeinträchtigen.

30

Es kommen als Kationen insbesondere Ionen der Alkalimetalle, vorzugsweise Lithium, Natrium und Kalium, der Erdalkalimetalle, vorzugsweise Calcium und Magnesium, und der Übergangsmetalle, vorzugsweise Mangan, Kupfer, Zink und Eisen, sowie Ammonium, wobei hier gewünschtenfalls ein bis vier Wasserstoffatome durch C₁-C₄-Alkyl, Hydroxy-C₁-C₄-alkyl, C₁-C₄-Alkoxy-C₁-C₄-alkyl, Hydroxy-C₁-C₄-alkoxy-C₁-C₄-alkyl, Phenyl oder Benzyl ersetzt sein können, vorzugsweise Ammonium, Dimethylammonium, Diisopropylammonium, Tetramethylammonium, Tetrabutylammonium, 2-(2-Hydroxyeth-1-oxy)eth-1-ylammonium, Di(2-hydroxyeth-1-yl)ammonium, Trimethylbenzylammonium, des weiteren Phosphoniumionen, Sulfoniumionen, vorzugsweise Tri(C₁-C₄-alkyl)sulfonium und Sulfoxoniumionen, vorzugsweise Tri(C₁-C₄-alkyl)sulfoxonium, in Betracht.

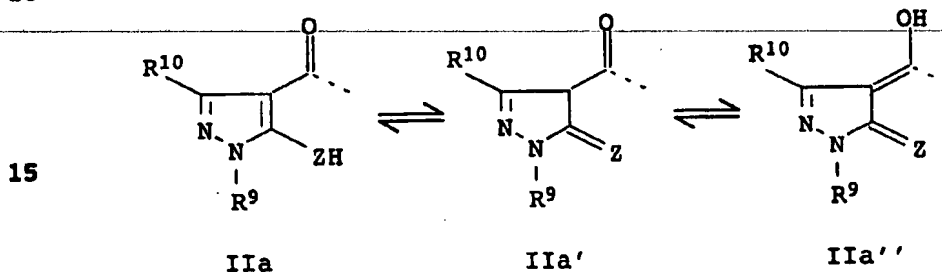
45

8

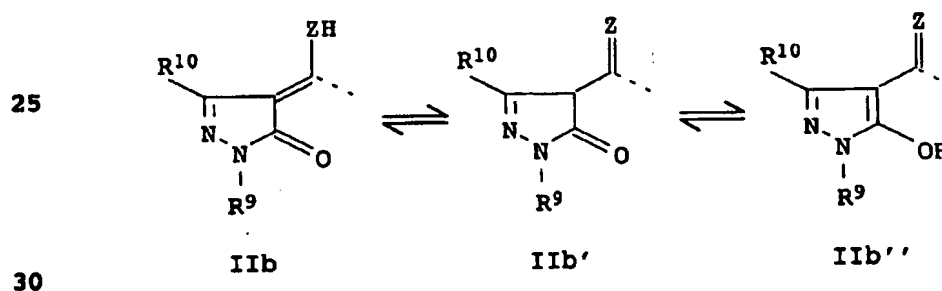
Anionen von brauchbaren Säureadditionsalzen sind in erster Linie Chlorid, Bromid, Fluorid, Hydrogensulfat, Sulfat, Dihydrogenphosphat, Hydrogenphosphat, Nitrat, Hydrogencarbonat, Carbonat, Hexafluorosilikat, Hexafluorophosphat, Benzoat sowie
 5 die Anionen von C₁-C₄-Alkansäuren, vorzugsweise Formiat, Acetat, Propionat und Butyrat.

Im Falle von R⁸ = Hydroxy oder Mercapto {Z = O, S} steht IIa auch stellvertretend für die tautomeren Formen IIa' und IIa''

10



20 bzw. IIb auch stellvertretend für die tautomeren Formen IIb' und IIb''.



Die für die Substituenten R¹ bis R¹⁶ oder als Reste an Phenyl- und Heterocycl-
 Resten genannten organischen Molekülteile stellen
 Sammelbegriffe für individuelle Aufzählungen der einzelnen
 35 Gruppenmitglieder dar. Sämtliche Kohlenwasserstoffketten, also
 alle Alkyl-, Halogenalkyl-, Alkoxy-, Halogenalkoxy-, Alkylthio-,
 Halogenalkylthio-, Alkylsulfinyl-, Halogenalkylsulfinyl-,
 Alkylsulfonyl-, Halogenalkylsulfonyl-, N-Alkylamino-,
 N,N-Dialkylamino-, N-Halogenalkylamino-, N-Alkoxyamino-,
 40 N-Alkoxy-N-alkylamino-, N-Alkylcarbonylamino-, Alkylcarbonyl-,
 Halogenalkylcarbonyl-, Alkoxycarbonyl-, Halogenalkoxycarbonyl-,
 Alkylthiocarbonyl-, Alkylcarbonyloxy-, Alkylaminocarbonyl-,
 Dialkylaminocarbonyl-, Dialkylaminothiocarbonyl-, Alkoxyalkyl-,
 Alkoxyiminoalkyl-, Phenylalkylcarbonyl-,
 45 Heterocyclalkylcarbonyl-, Phenylalkenylcarbonyl-,
 Heterocyclalkenylcarbonyl-, N-Alkoxy-N-alkylaminocarbonyl-,
 N-Alkyl-N-phenylaminocarbonyl-,

- N-Alkyl-N-heterocyclylaminocarbonyl-, Phenylalkyl-,
 Heterocyclylalkyl-, Phenylcarbonylalkyl-,
 Heterocyclylcarbonylalkyl-, Alkoxyalkoxycarbonyl-,
 Alkenylcarbonyl-, Alkenyloxycarbonyl-, Alkenylaminocarbonyl-,
 5 N-Alkenyl-N-alkylaminocarbonyl-,
 N-Alkenyl-N-alkoxyaminocarbonyl-, Alkinylcarbonyl-,
 Alkinyloxycarbonyl-, Alkinylaminocarbonyl-,
 N-Alkinyl-N-alkylaminocarbonyl-,
 N-Alkinyl-N-alkoxyaminocarbonyl-, Alkenyl-, Alkinyl-,
 10 Halogenalkenyl-, Halogenalkinyl-, Alkenyloxy-, Alkinyloxy,
 Alkandiyl-, Alkendiyl-, Alkadiendiyl- oder Alkindiyl-Teile können
 geradkettig oder verzweigt sein. Sofern nicht anders angegeben
 tragen halogenierte Substituenten vorzugsweise ein bis fünf
 gleiche oder verschiedene Halogenatome. Die Bedeutung Halogen
 15 steht jeweils für Fluor, Chlor, Brom oder Iod.

Ferner bedeuten beispielsweise:

- C₁-C₄-Alkyl: z.B. Methyl, Ethyl, Propyl, 1-Methylethyl, Butyl,
 20 1-Methylpropyl, 2-Methylpropyl oder 1,1-Dimethylethyl;
- C₁-C₆-Alkyl, sowie die Alkylteile von C₁-C₆-Alkylamino,
 Di-(C₁-C₆-alkyl)amino, N-(C₁-C₆-Alkoxy)-N-(C₁-C₆-alkyl)amino,
 N(C₁-C₆-Alkoxy)-N-(C₁-C₆-alkyl)-aminocarbonyl,
 25 N-(C₃-C₆-Alkenyl)-N-(C₁-C₆-alkyl)-aminocarbonyl,
 (C₃-C₆-Alkinyl)-N-(C₁-C₆-alkyl)-aminocarbonyl,
 N-(C₁-C₆-Alkyl)-N-phenylaminocarbonyl,
 N-(C₁-C₆-Alkyl)-N-heterocyclylaminocarbonyl: C₁-C₄-Alkyl, wie
 voranstehend genannt, sowie z.B. Pentyl, 1-Methylbutyl,
 30 2-Methylbutyl, 3-Methylbutyl, 2,2-Dimethylpropyl,
 1-Ethylpropyl, Hexyl, 1,1-Dimethylpropyl, 1,2-Dimethylpropyl,
 1-Methylpentyl, 2-Methylpentyl, 3-Methylpentyl,
 4-Methylpentyl, 1,1-Dimethylbutyl, 1,2-Dimethylbutyl,
 1,3-Dimethylbutyl, 2,2-Dimethylbutyl, 2,3-Dimethylbutyl,
 35 3,3-Dimethylbutyl, 1-Ethylbutyl, 2-Ethylbutyl,
 1,1,2-Trimethylpropyl, 1-Ethyl-1-methylpropyl oder
 1-Ethyl-3-methylpropyl;
- C₁-C₄-Halogenalkyl: einen C₁-C₄-Alkylrest, wie vorstehend
 40 genannt, der partiell oder vollständig durch Fluor, Chlor,
 Brom und/oder Iod substituiert ist, also z.B. Chlormethyl,
 Dichlormethyl, Trichlormethyl, Fluormethyl, Difluormethyl,
 Trifluormethyl, Chlorfluormethyl, Dichlorfluormethyl,
 Chlordifluormethyl, 2-Fluorethyl, 2-Chlorethyl, 2-Bromethyl,
 45 2-Iodethyl, 2,2-Difluorethyl, 2,2,2-Trifluorethyl,
 2-Chlor-2-fluorethyl, 2-Chlor-2,2-difluorethyl,
 2,2-Dichlor-2-fluorethyl, 2,2,2-Trichlorethyl,

10

- Pentafluorethyl, 2-Fluorpropyl, 3-Fluorpropyl,
 2,2-Difluorpropyl, 2,3-Difluorpropyl, 2-Chlorpropyl,
 3-Chlorpropyl, 2,3-Dichlorpropyl, 2-Brompropyl, 3-Brompropyl,
 3,3,3-Trifluorpropyl, 3,3,3-Trichlorpropyl,
 5 2,2,3,3,3-Pentafluorpropyl, Heptafluorpropyl,
 1-(Fluormethyl)-2-fluorethyl, 1-(Chlormethyl)-2-chlorethyl,
 1-(Brommethyl)-2-bromethyl, 4-Fluorbutyl, 4-Chlorbutyl,
 4-Brombutyl oder Nonafluorbutyl;
- 10 - C₁-C₆-Halogenalkyl, sowie die Halogenalkylteile von
~~N-C₁-C₆-Halogenalkylamino~~: C₁-C₄-Halogenalkyl, wie
 voranstehend genannt, sowie z.B. 5-Fluorpentyl,
 5-Chlorpentyl, 5-Brompentyl, 5-Iodpentyl, Undecafluorpentyl,
 6-Fluorhexyl, 6-Chlorhexyl, 6-Bromhexyl, 6-Iodhexyl oder
 15 Dodecafluorhexyl;
- C₁-C₄-Alkoxy: z.B. Methoxy, Ethoxy, Propoxy, 1-Methylethoxy,
 Butoxy, 1-Methylpropoxy, 2-Methylpropoxy oder
 1,1-Dimethylethoxy;
- 20 - C₁-C₆-Alkoxy, sowie die Alkoxyteile von N-C₁-C₆-Alkoxyamino,
 N-(C₁-C₆-Alkoxy)-N-(C₁-C₆-alkyl)amino,
 C₁-C₆-Alkoxyimino-C₁-C₆-alkyl,
 N-(C₁-C₆-Alkoxy)-N-(C₁-C₆-alkyl)-aminocarbonyl,
 25 N-(C₃-C₆-Alkenyl)-N-(C₁-C₆-alkoxy)-aminocarbonyl und
 N-(C₃-C₆-Alkynyl)-N-(C₁-C₆-alkoxy)-aminocarbonyl:
 C₁-C₄-Alkoxy, wie voranstehend genannt, sowie z.B. Pentoxy,
 1-Methylbutoxy, 2-Methylbutoxy, 3-Methylbutoxy,
 1,1-Dimethylpropoxy, 1,2-Dimethylpropoxy,
 30 2,2-Dimethylpropoxy, 1-Ethylpropoxy, Hexoxy, 1-Methylpentoxy,
 2-Methylpentoxy, 3-Methylpentoxy, 4-Methylpentoxy,
 1,1-Dimethylbutoxy, 1,2-Dimethylbutoxy, 1,3-Dimethylbutoxy,
 2,2-Dimethylbutoxy, 2,3-Dimethylbutoxy, 3,3-Dimethylbutoxy,
 1-Ethylbutoxy, 2-Ethylbutoxy, 1,1,2-Trimethylpropoxy,
 35 1,2,2-Trimethylpropoxy, 1-Ethyl-1-methylpropoxy oder
 1-Ethyl-2-methylpropoxy;
- C₁-C₄-Halogenalkoxy: einen C₁-C₄-Alkoxyrest, wie voranstehend
 genannt, der partiell oder vollständig durch Fluor, Chlor,
 40 Brom und/oder Iod substituiert ist, also z.B. Fluormethoxy,
 Difluormethoxy, Trifluormethoxy, Chlordifluormethoxy,
 Bromdifluormethoxy, 2-Fluorethoxy, 2-Chlorethoxy,
 2-Brommethoxy, 2-Iodethoxy, 2,2-Difluorethoxy,
 2,2,2-Trifluorethoxy, 2-Chlor-2-fluorethoxy,
 45 2-Chlor-2,2-difluorethoxy, 2,2-Di-chlor-2-fluorethoxy,
 2,2,2-Trichlorethoxy, Pentafluorethoxy, 2-Fluorpropoxy,
 3-Fluorpropoxy, 2-Chlorpropoxy, 3-Chlorpropoxy,

11

- 2-Brompropoxy, 3-Brompropoxy, 2,2-Difluorpropoxy,
2,3-Difluorpropoxy, 2,3-Dichlorpropoxy,
3,3,3-Trifluorpropoxy, 3,3,3-Trichlorpropoxy,
2,2,3,3,3-Pentafluorpropoxy, Heptafluorpropoxy,
5 1-(Fluormethyl)-2-fluorethoxy, 1-(Chlormethyl)-2-chlorethoxy,
1-(Brommethyl)-2-bromethoxy, 4-Fluorbutoxy, 4-Chlorbutoxy,
4-Brombutoxy oder Nonafluorbutoxy;
- 10 — C₁-C₆-Halogenalkoxy: C₁-C₄-Halogenalkoxy, wie voranstehend
genannt, sowie z.B. 5-Fluorpentoxy, 5-Chlorpentoxy,
5-Brompentoxy, 5-Iodpentoxy, Undecafluorpentoxy,
6-Fluorhexoxy, 6-Chlorhexoxy, 6-Bromhexoxy, 6-Iodhexoxy oder
Dodecafluorhexoxy;
- 15 — C₁-C₄-Alkylthio (C₁-C₄-Alkylsulfanyl: C₁-C₄-Alkyl-S-): z.B.
Methylthio, Ethylthio, Propylthio, 1-Methylethylthio,
Butylthio, 1-Methylpropylthio, 2-Methylpropylthio oder
1,1-Dimethylethylthio;
- 20 — C₁-C₆-Alkylthio, sowie die Alkylthioteile von
C₁-C₆-Alkylthiocarbonyl: C₁-C₄-Alkylthio, wie voranstehend
genannt, sowie z.B. Pentylthio, 1-Methylbutylthio,
2-Methylbutylthio, 3-Methylbutylthio, 2,2-Dimethylpropylthio,
1-Ethylpropylthio, Hexylthio, 1,1-Dimethylpropylthio,
25 1,2-Dimethylpropylthio, 1-Methylpentylthio,
2-Methylpentylthio, 3-Methylpentylthio, 4-Methylpentylthio,
1,1-Dimethylbutylthio, 1,2-Dimethylbutylthio,
1,3-Dimethylbutylthio, 2,2-Dimethylbutylthio,
2,3-Dimethylbutylthio, 3,3-Dimethylbutylthio,
30 1-Ethylbutylthio, 2-Ethylbutylthio,
1,1,2-Trimethylpropylthio, 1,2,2-Trimethylpropylthio,
1-Ethyl-1-methylpropylthio oder 1-Ethyl-2-methylpropylthio;
- C₁-C₄-Halogenalkylthio: einen C₁-C₄-Alkylthiorest, wie
35 voranstehend genannt, der partiell oder vollständig durch
Fluor, Chlor, Brom und/oder Iod substituiert ist, also z.B.
Fluormethylthio, Difluormethylthio, Trifluormethylthio,
Chlordifluormethylthio, Bromdifluormethylthio,
2-Fluorethylthio, 2-Chlorethylthio, 2-Bromethylthio,
40 2-Iodethylthio, 2,2-Difluorethylthio,
2,2,2-Trifluorethylthio, 2,2,2-Trichlorethylthio,
2-Chlor-2-fluorethylthio, 2-Chlor-2,2-difluorethylthio,
2,2-Dichlor-2-fluorethylthio, Pentafluorethylthio,
2-Fluorpropylthio, 3-Fluorpropylthio, 2-Chlorpropylthio,
45 3-Chlorpropylthio, 2-Brompropylthio, 3-Brompropylthio,
2,2-Difluorpropylthio, 2,3-Difluorpropylthio,
2,3-Dichlorpropylthio, 3,3,3-Trifluorpropylthio,

12

- 3,3,3-Tri-chlorpropylthio, 2,2,3,3,3-Pentafluorpropylthio, Heptafluorpropylthio, 1-(Fluormethyl)-2-fluorethylthio, 1-(Chlormethyl)-2-chlorethylthio, 1-(Brommethyl)-2-bromethylthio, 4-Fluorbutylthio, 4-Chlorbutylthio, 4-Brombutylthio oder Nonafluorbutylthio;
- 5
- C₁-C₆-Halogenalkylthio: C₁-C₄-Halogenalkylthio, wie vorstehend genannt, sowie 5-Fluorpentylthio, 5-Chlorpentylthio, 5-Brompentylthio, 5-Iodpentylthio, Undecafluorpentylthio, 6-Fluorhexylthio, 6-Chlorhexylthio, 6-Bromhexylthio, 6-Iodhexylthio oder Dodecafluorhexylthio;
- 10
-
- C₁-C₄-Alkylsulfinyl (C₁-C₄-Alkyl-S(=O)-): z.B. Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, Propylsulfinyl, 1-Methylethylsulfinyl, Butylsulfinyl, 1-Methylpropylsulfinyl, 2-Methylpropylsulfinyl oder 1,1-Dimethylethylsulfinyl;
- 15
- C₁-C₆-Alkylsulfinyl: C₁-C₄-Alkylsulfinyl, wie vorstehend genannt, sowie Pentylsulfinyl, 1-Methylbutylsulfinyl, 2-Methylbutylsulfinyl, 3-Methylbutylsulfinyl, 2,2-Dimethylpropylsulfinyl, 1-Ethylpropylsulfinyl, 1,1-Dimethylpropylsulfinyl, 1,2-Dimethylpropylsulfinyl, Hexylsulfinyl, 1-Methylpentylsulfinyl, 2-Methylpentylsulfinyl, 3-Methylpentylsulfinyl, 4-Methylpentylsulfinyl, 1,1-Dimethylbutylsulfinyl, 1,2-Dimethylbutylsulfinyl, 1,3-Dimethylbutylsulfinyl, 2,2-Dimethylbutylsulfinyl, 2,3-Dimethylbutylsulfinyl, 3,3-Dimethylbutylsulfinyl, 1-Ethylbutylsulfinyl, 2-Ethylbutylsulfinyl, 1,1,2-Trimethylpropylsulfinyl, 1,2,2-Trimethylpropylsulfinyl, 1-Ethyl-1-methylpropylsulfinyl oder 1-Ethyl-2-methylpropylsulfinyl;
- 20
- 25
- 30
- C₁-C₄-Halogenalkylsulfinyl: C₁-C₄-Alkylsulfinylrest, wie voranstehend genannt, der partiell oder vollständig durch Fluor, Chlor, Brom und/oder Iod substituiert ist, also z.B. Fluormethylsulfinyl, Difluormethylsulfinyl, Trifluormethylsulfinyl, Chlordifluormethylsulfinyl, Bromdifluormethylsulfinyl, 2-Fluorethylsulfinyl, 2-Chlorethylsulfinyl, 2-Bromethylsulfinyl, 2-Iodethylsulfinyl, 2,2-Difluorethylsulfinyl, 2,2,2-Trifluorethylsulfinyl, 2,2,2-Trichlorethylsulfinyl, 2-Chlor-2-fluorethylsulfinyl, 2-Chlor-2,2-difluorethylsulfinyl, 2,2-Dichlor-2-fluorethylsulfinyl, Pentafluorethylsulfinyl, 2-Fluorpropylsulfinyl, 3-Fluorpropylsulfinyl, 2-Chlorpropylsulfinyl, 3-Chlorpropylsulfinyl, 2-Brompropylsulfinyl, 3-Brompropylsulfinyl,
- 35
- 40
- 45

13

- 2,2-Difluorpropylsulfinyl, 2,3-Difluorpropylsulfinyl,
 2,3-Dichlorpropylsulfinyl, 3,3,3-Trifluorpropylsulfinyl,
 3,3,3-Trichlorpropylsulfinyl,
 2,2,3,3,3-Pentafluorpropylsulfinyl, Heptafluorpropylsulfinyl,
 5 1-(Fluormethyl)-2-fluorethylsulfinyl,
 1-(Chlormethyl)-2-chlorethylsulfinyl,
 1-(Brommethyl)-2-bromethylsulfinyl, 4-Fluorbutylsulfinyl,
 4-Chlorbutylsulfinyl, 4-Brombutylsulfinyl oder
 Nonafluorbutylsulfinyl;
- 10 - C₁-C₆-Halogenalkylsulfinyl: C₁-C₄-Halogenalkylsulfinyl, wie
 vorstehend genannt, sowie 5-Fluorpentylsulfinyl,
 5-Chlorpentylsulfinyl, 5-Brompentylsulfinyl,
 5-Iodpentylsulfinyl, Undecafluorpentylsulfinyl,
 15 6-Fluorhexylsulfinyl, 6-Chlorhexylsulfinyl,
 6-Bromhexylsulfinyl, 6-Iodhexylsulfinyl oder
 Dodecafluorhexylsulfinyl;
- C₁-C₄-Alkylsulfonyl (C₁-C₄-Alkyl-S(=O)₂-) z.B. Methylsulfonyl,
 20 Ethylsulfonyl, Propylsulfonyl, 1-Methylethylsulfonyl,
 Butylsulfonyl, 1-Methylpropylsulfonyl, 2-Methylpropylsulfonyl
 oder 1,1-Dimethylethylsulfonyl;
- C₁-C₆-Alkylsulfonyl: C₁-C₄-Alkylsulfonyl, wie vorstehend
 25 genannt, sowie Pentylsulfonyl, 1-Methylbutylsulfonyl,
 2-Methylbutylsulfonyl, 3-Methylbutylsulfonyl,
 1,1-Dimethylpropylsulfonyl, 1,2-Dimethylpropylsulfonyl,
 2,2-Dimethylpropylsulfonyl, 1-Ethylpropylsulfonyl,
 Hexylsulfonyl, 1-Methylpentylsulfonyl,
 30 2-Methylpentylsulfonyl, 3-Methylpentylsulfonyl,
 4-Methylpentylsulfonyl, 1,1-Dimethylbutylsulfonyl,
 1,2-Dimethylbutylsulfonyl, 1,3-Dimethylbutylsulfonyl,
 2,2-Dimethylbutylsulfonyl, 2,3-Dimethylbutylsulfonyl,
 3,3-Dimethylbutylsulfonyl, 1-Ethylbutylsulfonyl,
 35 2-Ethylbutylsulfonyl, 1,1,2-Trimethylpropylsulfonyl,
 1,2,2-Trimethylpropylsulfonyl, 1-Ethyl-1-methylpropylsulfonyl
 oder 1-Ethyl-2-methylpropylsulfonyl;
- C₁-C₄-Halogenalkylsulfonyl einen C₁-C₄-Alkylsulfonylrest, wie
 40 voranstehend genannt, der partiell oder vollständig durch
 Fluor, Chlor, Brom und/oder Iod substituiert ist, also z.B.
 Fluormethylsulfonyl, Difluormethylsulfonyl,
 Trifluormethylsulfonyl, Chlordifluormethylsulfonyl,
 Bromdifluormethylsulfonyl, 2-Fluorethylsulfonyl,
 45 2-Chlorethylsulfonyl, 2-Bromethylsulfonyl,
 2-Iodethylsulfonyl, 2,2-Difluorethylsulfonyl,
 2,2,2-Trifluorethylsulfonyl, 2-Chlor-2-fluorethylsulfonyl,

14

- 2-Chlor-2,2-difluorethylsulfonyl,
 2,2-Dichlor-2-fluorethylsulfonyl,
 2,2,2-Trichlorethylsulfonyl, Pentafluorethylsulfonyl,
 2-Fluorpropylsulfonyl, 3-Fluorpropylsulfonyl,
 5 2-Chlorpropylsulfonyl, 3-Chlorpropylsulfonyl,
 2-Brompropylsulfonyl, 3-Brompropylsulfonyl,
 2,2-Difluorpropylsulfonyl, 2,3-Difluorpropylsulfonyl,
 2,3-Dichlorpropylsulfonyl, 3,3,3-Trifluorpropylsulfonyl,
 3,3,3-Trichlorpropylsulfonyl,
 10 2,2,3,3,3-Pentafluorpropylsulfonyl, Heptafluorpropylsulfonyl,
 1-(Fluormethyl)-2-fluorethylsulfonyl,
 1-(Chlormethyl)-2-chlorethylsulfonyl,
 1-(Brommethyl)-2-bromethylsulfonyl, 4-Fluorbutylsulfonyl,
 4-Chlorbutylsulfonyl, 4-Brombutylsulfonyl oder
 15 Nonafluorbutylsulfonyl;
- C₁-C₆-Halogenalkylsulfonyl: C₁-C₄-Halogenalkylsulfonyl, wie
 vorstehend genannt, sowie 5-Fluorpentylsulfonyl,
 5-Chlorpentylsulfonyl, 5-Brompentylsulfonyl,
 20 5-Iodpentylsulfonyl, 6-Fluorhexylsulfonyl,
 6-Bromhexylsulfonyl, 6-Iodhexylsulfonyl oder
 Dodecafluorhexylsulfonyl;
- C₁-C₆-Alkylamino: Methylamino, Ethylamino, Propylamino,
 25 1-Methylethylamino, Butylamino, 1-Methylpropylamino,
 2-Methylpropylamino, 1,1-Dimethylethylamino, Pentylamino,
 1-Methylbutylamino, 2-Methylbutylamino, 3-Methylbutylamino,
 2,2-Dimethylpropylamino, 1-Ethylpropylamino, Hexylamino,
 1,1-Dimethylpropylamino, 1,2-Dimethylpropylamino,
 30 1-Methylpentylamino, 2-Methylpentylamino,
 3-Methylpentylamino, 4-Methylpentylamino,
 1,1-Dimethylbutylamino, 1,2-Dimethylbutylamino,
 1,3-Dimethylbutylamino, 2,2-Dimethylbutylamino,
 2,3-Dimethylbutylamino, 3,3-Dimethylbutylamino,
 35 1-Ethylbutylamino, 2-Ethylbutylamino,
 1,1,2-Trimethylpropylamino, 1,2,2-Trimethylpropylamino,
 1-Ethyl-1-methylpropylamino oder 1-Ethyl-2-methylpropylamino;
- Di-(C₁-C₄-alkyl)amino, also z.B. N,N-Dimethylamino,
 40 N,N-Di-ethylamino, N,N-Dipropylamino,
 N,N-Di-(1-methylethyl)amino, N,N-Dibutylamino,
 N,N-Di-(1-methylpropyl)amino, N,N-Di-(2-methylpropyl)amino,
 N,N-Di-(1,1-dimethylethyl)amino, N-Ethyl-N-methylamino,
 N-Methyl-N-propylamino, N-Methyl-N-(1-methylethyl)amino,
 45 N-Butyl-N-methylamino, N-Methyl-N-(1-methylpropyl)amino,
 N-Methyl-N-(2-methylpropyl)amino,
 N-(1,1-Di-methylethyl)-N-methylamino, N-Ethyl-N-propylamino,

15

- N-Ethyl-N-(1-methylethyl)amino, N-Butyl-N-ethylamino,
 N-Ethyl-N-(1-methylpropyl)amino,
 N-Ethyl-N-(2-methylpropyl)amino,
 N-Ethyl-N-(1,1-dimethylethyl)amino,
 5 N-(1-Methylethyl)-N-propylamino, N-Butyl-N-propylamino,
 N-(1-Methylpropyl)-N-propylamino,
 N-(2-Methylpropyl)-N-propylamino,
 N-(1,1-Dimethylethyl)-N-propylamino,
 N-Butyl-N-(1-methylethyl)amino,
 10 N-(1-Methylethyl)-N-(1-methylpropyl)amino,
 N-(1-Methylethyl)-N-(2-methylpropyl)amino,
 N-(1,1-Dimethylethyl)-N-(1-methylethyl)amino,
 N-Butyl-N-(1-methylpropyl)-amino,
 N-Butyl-N-(2-methylpropyl)amino,
 15 N-Butyl-N-(1,1-dimethylethyl)amino,
 N-(1-Methylpropyl)-N-(2-methylpropyl)-amino,
 N-(1,1-Dimethylethyl)-N-(1-methylpropyl)-amino oder
 N-(1,1-Dimethylethyl)-N-(2-methylpropyl)amino;
- 20 - Di-(C₁-C₆-alkyl)amino: Di-(C₁-C₄-alkyl)amino wie voranstehend
 genannt, sowie N,N-Dipentylamino, N,N-Dihexylamino,
 N-Methyl-N-pentylamino, N-Ethyl-N-pentylamino,
 N-Methyl-N-hexylamino oder N-Ethyl-N-hexylamino;
- 25 - C₁-C₄-Alkylcarbonyl: z.B. Methylcarbonyl, Ethylcarbonyl,
 Propylcarbonyl, 1-Methylethylcarbonyl, Butylcarbonyl,
 1-Methylpropylcarbonyl, 2-Methylpropylcarbonyl oder
 1,1-Dimethylethylcarbonyl;
- 30 - C₁-C₆-Alkylcarbonyl, sowie die Alkylcarbonylreste von
 C₁-C₆-Alkylcarbonyl-C₁-C₆-alkyl, C₁-C₆-Alkylcarbonylamino:
 C₁-C₄-Alkylcarbonyl, wie voranstehend genannt, sowie z.B.
 Pentylcarbonyl, 1-Methylbutylcarbonyl, 2-Methylbutylcarbonyl,
 3-Methylbutylcarbonyl, 2,2-Dimethylpropylcarbonyl,
 35 1-Ethylpropylcarbonyl, Hexylcarbonyl,
 1,1-Dimethylpropylcarbonyl, 1,2-Dimethylpropylcarbonyl,
 1-Methylpentylcarbonyl, 2-Methylpentylcarbonyl,
 3-Methylpentylcarbonyl, 4-Methylpentylcarbonyl,
 1,1-Dimethylbutylcarbonyl, 1,2-Dimethylbutylcarbonyl,
 40 1,3-Dimethylbutylcarbonyl, 2,2,-Dimethylbutylcarbonyl,
 2,3-Dimethylbutylcarbonyl, 3,3-Dimethylbutylcarbonyl,
 1-Ethylbutylcarbonyl, 2-Ethylbutylcarbonyl,
 1,1,2-Trimethylpropylcarbonyl, 1,2,2-Trimethylpropylcarbonyl,
 1-Ethyl-1-methylpropylcarbonyl oder
 45 1-Ethyl-2-methylpropylcarbonyl;

16

- C₁-C₄-Halogenalkylcarbonyl: einen C₁-C₄-Alkylcarbonylrest, wie vorstehend genannt, der partiell oder vollständig durch Fluor, Chlor, Brom und/oder Iod substituiert ist, also z.B. Chloracetyl, Dichloracetyl, Trichloracetyl, Fluoracetyl, Difluoracetyl, Trifluoracetyl, Chlorfluoracetyl, Dichlor-fluoracetyl, Chlordifluoracetyl, 2-Fluorethylcarbonyl, 2-Chlorethylcarbonyl, 2-Bromethylcarbonyl, 2-Iodethylcarbonyl, 2,2-Difluorethylcarbonyl, 2,2,2-Trifluorethylcarbonyl, 2-Chlor-2-fluorethylcarbonyl, 2-Chlor-2,2-difluorethylcarbonyl, 2,2-Dichlor-2-fluorethylcarbonyl, 2,2,2-Trichlorethylcarbonyl, Pentafluorethylcarbonyl, 2-Fluorpropylcarbonyl, 3-Fluorpropylcarbonyl, 2,2-Difluorpropylcarbonyl, 2,3-Di-fluorpropylcarbonyl, 2-Chlorpropylcarbonyl, 3-Chlorpropylcarbonyl, 2,3-Dichlorpropylcarbonyl, 2-Brompropylcarbonyl, 3-Brompropylcarbonyl, 3,3,3-Trifluorpropylcarbonyl, 3,3,3-Trichlorpropylcarbonyl, 2,2,3,3,3-Pentafluorpropylcarbonyl, Heptafluorpropylcarbonyl, 1-(Fluormethyl)-2-fluorethylcarbonyl, 1-(Chlormethyl)-2-chlorethylcarbonyl, 1-(Brommethyl)-2-bromethylcarbonyl, 4-Fluorbutylcarbonyl, 4-Chlorbutylcarbonyl, 4-Brombutylcarbonyl oder 25 Nonafluorbutylcarbonyl;
- C₁-C₆-Halogenalkylcarbonyl: einen C₁-C₄-Halogenalkylcarbonylrest wie voranstehend genannt, sowie 5-Fluorpentylcarbonyl, 5-Chlorpentylcarbonyl, 5-Brompentylcarbonyl, Perfluorpentylcarbonyl, 6-Fluorhexylcarbonyl, 6-Chlorhexylcarbonyl, 6-Bromhexylcarbonyl oder Perfluorhexylcarbonyl;
- C₁-C₄-Alkoxy carbonyl also z.B. Methoxycarbonyl, Ethoxycarbonyl, Propoxycarbonyl, 1-Methylethoxycarbonyl, Butoxycarbonyl, 1-Methylpropoxycarbonyl, 2-Methylpropoxycarbonyl oder 1,1-Dimethylethoxycarbonyl;
- C₁-C₆-Alkoxy carbonyl: C₁-C₄-Alkoxy carbonyl, wie vorstehend genannt, sowie z.B. Pentoxycarbonyl, 1-Methylbutoxycarbonyl, 2-Methylbutoxycarbonyl, 3-Methylbutoxycarbonyl, 2,2-Dimethylpropoxycarbonyl, 1-Ethylpropoxycarbonyl, Hexoxycarbonyl, 1,1-Dimethylpropoxycarbonyl, 1,2-Dimethylpropoxycarbonyl, 1-Methylpentoxycarbonyl, 2-Methylpentoxycarbonyl, 3-Methylpentoxycarbonyl, 4-Methylpentoxycarbonyl, 1,1-Dimethylbutoxycarbonyl, 1,2-Dimethylbutoxycarbonyl, 1,3-Dimethylbutoxycarbonyl,

17

- 2,2-Dimethylbutoxycarbonyl, 2,3-Dimethylbutoxycarbonyl,
 3,3-Dimethylbutoxycarbonyl, 1-Ethylbutoxycarbonyl,
 2-Ethylbutoxycarbonyl, 1,1,2-Trimethylpropoxycarbonyl,
 1,2,2-Trimethylpropoxycarbonyl,
 5 1-Ethyl-1-methyl-propoxycarbonyl oder
 1-Ethyl-2-methyl-propoxycarbonyl;
- C₁-C₄-Halogenalkoxycarbonyl: einen C₁-C₄-Alkoxycarbonylrest,
 wie voranstehend genannt, der partiell oder vollständig durch
 10 Fluor, Chlor, Brom und/oder Iod substituiert ist, also z.B.
 Fluormethoxycarbonyl, Difluormethoxycarbonyl,
 Trifluormethoxycarbonyl, Chlordifluormethoxycarbonyl,
 Bromdifluormethoxycarbonyl, 2-Fluorethoxycarbonyl,
 2-Chlorethoxycarbonyl, 2-Bromethoxycarbonyl,
 15 2-Iodethoxycarbonyl, 2,2-Difluorethoxycarbonyl,
 2,2,2-Trifluorethoxycarbonyl, 2-Chlor-2-fluorethoxycarbonyl,
 2-Chlor-2,2-difluorethoxycarbonyl,
 2,2-Dichlor-2-fluorethoxycarbonyl,
 2,2,2-Trichlorethoxycarbonyl, Pentafluorethoxycarbonyl,
 20 2-Fluorpropoxycarbonyl, 3-Fluorpropoxycarbonyl,
 2-Chlorpropoxycarbonyl, 3-Chlorpropoxycarbonyl,
 2-Brompropoxycarbonyl, 3-Brompropoxycarbonyl,
 2,2-Difluorpropoxycarbonyl, 2,3-Difluorpropoxycarbonyl,
 2,3-Dichlorpropoxycarbonyl, 3,3,3-Trifluorpropoxycarbonyl,
 25 3,3,3-Trichlorpropoxycarbonyl,
 2,2,3,3,3-Pentafluorpropoxycarbonyl,
 Heptafluorpropoxycarbonyl,
 1-(Fluormethyl)-2-fluorethoxycarbonyl,
 1-(Chlormethyl)-2-chlorethoxycarbonyl,
 30 1-(Brommethyl)-2-bromethoxycarbonyl, 4-Fluorbutoxycarbonyl,
 4-Chlorbutoxycarbonyl, 4-Brombutoxycarbonyl oder
 4-Iodbutoxycarbonyl;
- C₁-C₆-Halogenoxycarbonyl: einen C₁-C₄-Halogenoxycarbonylrest
 35 wie voranstehend genannt, sowie 5-Fluorpentoxycarbonyl,
 5-Chlorpentoxycarbonyl, 5-Brompentoxycarbonyl,
 6-Fluorhexoxycarbonyl, 6-Chlorhexoxycarbonyl oder
 6-Bromhexoxycarbonyl;
- 40 - (C₁-C₄-Alkyl)carbonyloxy: Acetyloxy, Ethylcarbonyloxy,
 Propylcarbonyloxy, 1-Methylethylcarbonyloxy,
 Butylcarbonyloxy, 1-Methylpropylcarbonyloxy,
 2-Methylpropylcarbonyloxy oder 1,1-Dimethylethylcarbonyloxy;
- 45 - (C₁-C₄-Alkylamino)carbonyl: z.B. Methylaminocarbonyl,
 Ethylaminocarbonyl, Propylaminocarbonyl,
 1-Methylethylaminocarbonyl, Butylaminocarbonyl,

18

1-Methylpropylaminocarbonyl, 2-Methylpropylaminocarbonyl oder
1,1-Dimethylethylaminocarbonyl;

- 5 — (C₁-C₆-Alkylamino)carbonyl: (C₁-C₄-Alkylamino)carbonyl, wie
vorstehend genannt, sowie z.B. Pentylaminocarbonyl,
1-Methylbutylaminocarbonyl, 2-Methylbutylaminocarbonyl,
3-Methylbutylaminocarbonyl, 2,2-Dimethylpropylaminocarbonyl,
1-Ethylpropylaminocarbonyl, Hexylaminocarbonyl,
1,1-Dimethylpropylaminocarbonyl,
10 1,2-Dimethylpropylaminocarbonyl, 1-Methylpentylaminocarbonyl,
2-Methylpentylaminocarbonyl, 3-Methylpentylaminocarbonyl,
4-Methylpentylaminocarbonyl, 1,1-Dimethylbutylaminocarbonyl,
1,2-Dimethylbutylaminocarbonyl,
1,3-Dimethylbutylaminocarbonyl,
15 2,2-Dimethylbutylaminocarbonyl,
2,3-Dimethylbutylaminocarbonyl,
3,3-Dimethylbutylaminocarbonyl, 1-Ethylbutylaminocarbonyl,
2-Ethylbutylaminocarbonyl,
1,1,2-Trimethylpropylaminocarbonyl,
20 1,2,2-Trimethylpropylaminocarbonyl,
1-Ethyl-1-methylpropylaminocarbonyl oder
1-Ethyl-2-methylpropylaminocarbonyl;
- Di-(C₁-C₄-alkyl)-aminocarbonyl: z.B.
25 N,N-Dimethylaminocarbonyl, N,N-Diethylaminocarbonyl,
N,N-Di-(1-methylethyl)aminocarbonyl,
N,N-Dipropylaminocarbonyl, N,N-Dibutylaminocarbonyl,
N,N-Di-(1-methylpropyl)-aminocarbonyl,
N,N-Di-(2-methylpropyl)-aminocarbonyl,
30 N,N-Di-(1,1-dimethylethyl)-aminocarbonyl,
N-Ethyl-N-methylaminocarbonyl,
N-Methyl-N-propylaminocarbonyl,
N-Methyl-N-(1-methylethyl)-aminocarbonyl,
N-Butyl-N-methylaminocarbonyl,
35 N-Methyl-N-(1-methylpropyl)-aminocarbonyl,
N-Methyl-N-(2-methylpropyl)-aminocarbonyl,
N-(1,1-Dimethylethyl)-N-methylaminocarbonyl,
N-Ethyl-N-propylaminocarbonyl,
N-Ethyl-N-(1-methylethyl)-aminocarbonyl,
40 N-Butyl-N-ethylaminocarbonyl,
N-Ethyl-N-(1-methylpropyl)-aminocarbonyl,
N-Ethyl-N-(2-methylpropyl)-aminocarbonyl,
N-Ethyl-N-(1,1-dimethylethyl)-aminocarbonyl,
N-(1-Methylethyl)-N-propylaminocarbonyl,
45 N-Butyl-N-propylaminocarbonyl,
N-(1-Methylpropyl)-N-propylaminocarbonyl,
N-(2-Methylpropyl)-N-propylaminocarbonyl,

19

- N-(1,1-Dimethylethyl)-N-propylaminocarbonyl,
 N-Butyl-N-(1-methylethyl)-aminocarbonyl,
 N-(1-Methylethyl)-N-(1-methylpropyl)-aminocarbonyl,
 N-(1-Methylethyl)-N-(2-methylpropyl)-aminocarbonyl,
 5 N-(1,1-Dimethylethyl)-N-(1-methylethyl)-aminocarbonyl,
 N-Butyl-N-(1-methylpropyl)-aminocarbonyl,
 N-Butyl-N-(2-methylpropyl)-aminocarbonyl,
 N-Butyl-N-(1,1-dimethylethyl)-aminocarbonyl,
 N-(1-Methylpropyl)-N-(2-methylpropyl)-aminocarbonyl,
 10 N-(1,1-Dimethylethyl)-N-(1-methylpropyl)-aminocarbonyl oder
 N-(1,1-Dimethylethyl)-N-(2-methylpropyl)-aminocarbonyl;

- Di-(C₁-C₆-alkyl)-aminocarbonyl:
 Di-(C₁-C₄-alkyl)-aminocarbonyl, wie voranstehend genannt,
 15 sowie z.B. N-Methyl-N-pentylaminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(1-methylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(2-methylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(3-methylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(2,2-dimethylpropyl)-aminocarbonyl,
 20 N-Methyl-N-(1-ethylpropyl)-aminocarbonyl,
 N-Methyl-N-hexylaminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(1,1-dimethylpropyl)-aminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(1,2-dimethylpropyl)-aminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(1-methylpentyl)-aminocarbonyl,
 25 N-Methyl-N-(2-methylpentyl)-aminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(3-methylpentyl)-aminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(4-methylpentyl)-aminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(1,1-dimethylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(1,2-dimethylbutyl)-aminocarbonyl,
 30 N-Methyl-N-(1,3-dimethylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(2,2-dimethylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(2,3-dimethylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(3,3-dimethylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(1-ethylbutyl)-aminocarbonyl,
 35 N-Methyl-N-(2-ethylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(1,1,2-trimethylpropyl)-aminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(1,2,2-trimethylpropyl)-aminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(1-ethyl-1-methylpropyl)-aminocarbonyl,
 N-Methyl-N-(1-ethyl-2-methylpropyl)-aminocarbonyl,
 40 N-Ethyl-N-pentylaminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1-methylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(2-methylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(3-methylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(2,2-dimethylpropyl)-aminocarbonyl,
 45 N-Ethyl-N-(1-ethylpropyl)-aminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-hexylaminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1,1-dimethylpropyl)-aminocarbonyl,

20

- N-Ethyl-N-(1,2-dimethylpropyl)-aminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1-methylpentyl)-aminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(2-methylpentyl)-aminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(3-methylpentyl)-aminocarbonyl,
 5 N-Ethyl-N-(4-methylpentyl)-aminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1,1-dimethylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1,2-dimethylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1,3-dimethylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(2,2-dimethylbutyl)-aminocarbonyl,
 10 N-Ethyl-N-(2,3-dimethylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(3,3-dimethylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1-ethylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(2-ethylbutyl)-aminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1,1,2-trimethylpropyl)-aminocarbonyl,
 15 N-Ethyl-N-(1,2,2-trimethylpropyl)-aminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1-ethyl-1-methylpropyl)-aminocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1-ethyl-2-methylpropyl)-aminocarbonyl,
 N-Propyl-N-pentylaminocarbonyl,
 N-Butyl-N-pentylaminocarbonyl, N,N-Dipentylaminocarbonyl,
 20 N-Propyl-N-hexylaminocarbonyl, N-Butyl-N-hexylaminocarbonyl,
 N-Pentyl-N-hexylaminocarbonyl oder N,N-Dihexylaminocarbonyl;

 - Di-(C₁-C₆-alkyl)-aminothiocarbonyl: z.B.
 N,N-Dimethylaminothiocarbonyl, N,N-Diethylaminothiocarbonyl,
 25 N,N-Di-(1-methylethyl)aminothiocarbonyl,
 N,N-Dipropylaminothiocarbonyl, N,N-Dibutylaminothiocarbonyl,
 N,N-Di-(1-methylpropyl)-aminothiocarbonyl,
 N,N-Di-(2-methylpropyl)-aminothiocarbonyl,
 N,N-Di-(1,1-dimethylethyl)-aminothiocarbonyl,
 30 N-Ethyl-N-methylaminothiocarbonyl,
 N-Methyl-N-propylaminothiocarbonyl,
 N-Methyl-N-(1-methylethyl)-aminothiocarbonyl,
 N-Butyl-N-methylaminothiocarbonyl,
 N-Methyl-N-(1-methylpropyl)-aminothiocarbonyl,
 35 N-Methyl-N-(2-methylpropyl)-aminothiocarbonyl,
 N-(1,1-Dimethylethyl)-N-methylaminothiocarbonyl,
 N-Ethyl-N-propylaminothiocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1-methylethyl)-aminothiocarbonyl,
 N-Butyl-N-ethylaminothiocarbonyl,
 40 N-Ethyl-N-(1-methylpropyl)-aminothiocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(2-methylpropyl)-aminothiocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1,1-dimethylethyl)-aminothiocarbonyl,
 N-(1-Methylethyl)-N-propylaminothiocarbonyl,
 N-Butyl-N-propylaminothiocarbonyl,
 45 N-(1-Methylpropyl)-N-propylaminothiocarbonyl,
 N-(2-Methylpropyl)-N-propylaminothiocarbonyl,
 N-(1,1-Dimethylethyl)-N-propylaminothiocarbonyl,

21

- N-Butyl-N-(1-methylethyl)-aminothiocarbonyl,
N-(1-Methylethyl)-N-(1-methylpropyl)-aminothiocarbonyl,
N-(1-Methylethyl)-N-(2-methylpropyl)-aminothiocarbonyl,
N-(1,1-Dimethylethyl)-N-(1-methylethyl)-aminothiocarbonyl,
5 N-Butyl-N-(1-methylpropyl)-aminothiocarbonyl,
N-Butyl-N-(2-methylpropyl)-aminothiocarbonyl,
N-Butyl-N-(1,1-dimethylethyl)-aminothiocarbonyl,
N-(1-Methylpropyl)-N-(2-methylpropyl)-aminothiocarbonyl,
N-(1,1-Dimethylethyl)-N-(1-methylpropyl)-aminothiocarbonyl,
10 N-(1,1-Dimethylethyl)-N-(2-methylpropyl)-aminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-pentylaminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-(1-methylbutyl)-aminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-(2-methylbutyl)-aminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-(3-methylbutyl)-aminothiocarbonyl,
15 N-Methyl-N-(2,2-dimethylpropyl)-aminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-(1-ethylpropyl)-aminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-hexylaminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-(1,1-dimethylpropyl)-aminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-(1,2-dimethylpropyl)-aminothiocarbonyl,
20 N-Methyl-N-(1-methylpentyl)-aminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-(2-methylpentyl)-aminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-(3-methylpentyl)-aminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-(4-methylpentyl)-aminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-(1,1-dimethylbutyl)-aminothiocarbonyl,
25 N-Methyl-N-(1,2-dimethylbutyl)-aminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-(1,3-dimethylbutyl)-aminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-(2,2-dimethylbutyl)-aminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-(2,3-dimethylbutyl)-aminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-(3,3-dimethylbutyl)-aminothiocarbonyl,
30 N-Methyl-N-(1-ethylbutyl)-aminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-(2-ethylbutyl)-aminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-ethyl-N-(1,1,2-trimethylpropyl)-aminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-(1,2,2-trimethylpropyl)-aminothiocarbonyl,
N-Methyl-N-(1-ethyl-1-methylpropyl)-aminothiocarbonyl,
35 N-Methyl-N-(1-ethyl-2-methylpropyl)-aminothiocarbonyl,
N-Ethyl-N-pentylaminothiocarbonyl,
N-Ethyl-N-(1-methylbutyl)-aminothiocarbonyl,
N-Ethyl-N-(2-methylbutyl)-aminothiocarbonyl,
N-Ethyl-N-(3-methylbutyl)-aminothiocarbonyl,
40 N-Ethyl-N-(2,2-dimethylpropyl)-aminothiocarbonyl,
N-Ethyl-N-(1-ethylpropyl)-aminothiocarbonyl,
N-Ethyl-N-hexylaminothiocarbonyl,
N-Ethyl-N-(1,1-dimethylpropyl)-aminothiocarbonyl,
N-Ethyl-N-(1,2-dimethylpropyl)-aminothiocarbonyl,
45 N-Ethyl-N-(1-methylpentyl)-aminothiocarbonyl,
N-Ethyl-N-(2-methylpentyl)-aminothiocarbonyl,
N-Ethyl-N-(3-methylpentyl)-aminothiocarbonyl,

22

- N-Ethyl-N-(4-methylpentyl)-aminothiocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1,1-dimethylbutyl)-aminothiocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1,2-dimethylbutyl)-aminothiocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1,3-dimethylbutyl)-aminothiocarbonyl,
 5 N-Ethyl-N-(2,2-dimethylbutyl)-aminothiocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(2,3-dimethylbutyl)-aminothiocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(3,3-dimethylbutyl)-aminothiocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1-ethylbutyl)-aminothiocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(2-ethylbutyl)-aminothiocarbonyl,
 10 N-Ethyl-N-(1,1,2-trimethylpropyl)-aminothiocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1,2,2-trimethylpropyl)-aminothiocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1-ethyl-1-methylpropyl)-aminothiocarbonyl,
 N-Ethyl-N-(1-ethyl-2-methylpropyl)-aminothiocarbonyl,
 N-Propyl-N-pentylaminothiocarbonyl,
 15 N-Butyl-N-pentylaminothiocarbonyl,
 N,N-Dipentylaminothiocarbonyl,
 N-Propyl-N-hexylaminothiocarbonyl,
 N-Butyl-N-hexylaminothiocarbonyl,
 N-Pentyl-N-hexylaminothiocarbonyl oder
 20 N,N-Dihexylaminothiocarbonyl;
- C₁-C₆-Hydroxyalkyl: durch ein bis drei OH-Gruppen substituier-
 tes C₁-C₆-Alkyl, z.B. Hydroxymethyl, 1-Hydroxyethyl, 2-Hydro-
 xyethyl, 1,2-Bishydroxyethyl, 1-Hydroxypropyl, 2-Hydroxypro-
 pyl, 3-Hydroxypropyl, 4-Hydroxybutyl, 2,2-Dimethyl-3-hydroxy-
 25 propyl;
- Phenyl-C₁-C₆-alkyl: durch einen Phenylrest substituiertes
 C₁-C₆-Alkyl, z.B. Benzyl, 1-Phenylethyl und 2-Phenylethyl,
 30 wobei der Phenylrest in der angegebenen Weise teilweise oder
 vollständig halogeniert sein kann oder einen bis drei der für
 Phenyl oben angegebenen Substituenten aufweisen kann;
 Heterocyclyl-C₁-C₆-alkyl steht dementsprechend für ein durch
 einen Heterocyclylrest substituiertes C₁-C₆-Alkyl;
- 35 - C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-alkyl: durch C₁-C₆-Alkoxy, wie vorstehend
 genannt, substituiertes C₁-C₆-Alkyl, also z.B. Methoxymethyl,
 Ethoxymethyl, Propoxymethyl, (1-Methylethoxy)methyl,
 Butoxymethyl, (1-Methylpropoxy)methyl,
 40 (2-Methylpropoxy)-methyl, (1,1-Dimethylethoxy)methyl,
 2-(Methoxy)ethyl, 2-(Ethoxy)ethyl, 2-(Propoxy)ethyl,
 2-(1-Methylethoxy)ethyl, 2-(Butoxy)ethyl,
 2-(1-Methylpropoxy)ethyl, 2-(2-Methylpropoxy)ethyl,
 2-(1,1-Dimethylethoxy)ethyl, 2-(Methoxy)-propyl,
 45 2-(Ethoxy)propyl, 2-(Propoxy)propyl,
 2-(1-Methylethoxy)-propyl, 2-(Butoxy)propyl,
 2-(1-Methylpropoxy)propyl, 2-(2-Methylpropoxy)propyl,

23

- 2-(1,1-Dimethylethoxy)propyl, 3-(Methoxy)propyl,
 3-(Ethoxy)-propyl, 3-(Propoxy)propyl,
 3-(1-Methylethoxy)propyl, 3-(Butoxy)propyl,
 3-(1-Methylpropoxy)propyl, 3-(2-Methylpropoxy)propyl,
 5 3-(1,1-Dimethylethoxy)propyl, 2-(Methoxy)butyl,
 2-(Ethoxy)butyl, 2-(Propoxy)butyl, 2-(1-Methylethoxy)butyl,
 2-(Butoxy)butyl, 2-(1-Methylpropoxy)butyl,
 2-(2-Methylpropoxy)butyl, 2-(1,1-Dimethylethoxy)butyl,
 3-(Methoxy)butyl, 3-(Ethoxy)butyl, 3-(Propoxy)butyl,
 10 3-(1-Methylethoxy)butyl, 3-(Butoxy)-butyl,
 3-(1-Methylpropoxy)butyl, 3-(2-Methylpropoxy)butyl,
 3-(1,1-Dimethylethoxy)butyl, 4-(Methoxy)butyl,
 4-(Ethoxy)-butyl, 4-(Propoxy)butyl, 4-(1-Methylethoxy)butyl,
 4-(Butoxy)-butyl, 4-(1-Methylpropoxy)butyl,
 15 4-(2-Methylpropoxy)butyl oder 4-(1,1-Dimethylethoxy)butyl;
- C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-alkoxy, sowie die Alkoxyalkoxyteile von
 C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-alkoxycarbonyl; durch C₁-C₆-Alkoxy, wie
 vorstehend genannt, substituiertes C₁-C₆-Alkoxy, also z.B. für
 20 Methoxymethoxy, Ethoxymethoxy, Propoxymethoxy,
 (1-Methylethoxy)methoxy, Butoxymethoxy,
 (1-Methylpropoxy)methoxy, (2-Methylpropoxy)methoxy,
 (1,1-Dimethylethoxy)methoxy, 2-(Methoxy)ethoxy,
 2-(Ethoxy)ethoxy, 2-(Propoxy)ethoxy,
 25 2-(1-Methylethoxy)ethoxy, 2-(Butoxy)ethoxy,
 2-(1-Methylpropoxy)ethoxy, 2-(2-Methylpropoxy)ethoxy,
 2-(1,1-Dimethylethoxy)ethoxy, 2-(Methoxy)propoxy,
 2-(Ethoxy)propoxy, 2-(Propoxy)propoxy,
 2-(1-Methylethoxy)propoxy, 2-(Butoxy)-propoxy,
 30 2-(1-Methylpropoxy)propoxy, 2-(2-Methylpropoxy)propoxy,
 2-(1,1-Dimethylethoxy)propoxy, 3-(Methoxy)-propoxy,
 3-(Ethoxy)propoxy, 3-(Propoxy)propoxy,
 3-(1-Methylethoxy)propoxy, 3-(Butoxy)propoxy,
 3-(1-Methylpropoxy)-propoxy, 3-(2-Methylpropoxy)propoxy,
 35 3-(1,1-Dimethylethoxy)propoxy, 2-(Methoxy)butoxy,
 2-(Ethoxy)butoxy, 2-(Propoxy)butoxy,
 2-(1-Methylethoxy)butoxy, 2-(Butoxy)-butoxy,
 2-(1-Methylpropoxy)butoxy, 2-(2-Methylpropoxy)butoxy,
 2-(1,1-Dimethylethoxy)butoxy, 3-(Methoxy)butoxy,
 40 3-(Ethoxy)-butoxy, 3-(Propoxy)butoxy,
 3-(1-Methylethoxy)butoxy, 3-(Butoxy)butoxy,
 3-(1-Methylpropoxy)butoxy, 3-(2-Methylpropoxy)butoxy,
 3-(1,1-Dimethylethoxy)butoxy, 4-(Methoxy)-butoxy,
 4-(Ethoxy)butoxy, 4-(Propoxy)butoxy,
 45 4-(1-Methylethoxy)butoxy, 4-(Butoxy)butoxy,

24

4-(1-Methylpropoxy)butoxy, 4-(2-Methylpropoxy)butoxy oder
4-(1,1-Dimethylethoxy)butoxy;

- C₁-C₆-Alkylcarbonyl-C₁-C₆-alkyl: Durch eine
 - 5 C₁-C₆-Alkylcarbonylgruppe substituiertes C₁-C₆-Alkyl, worin
beide der C₁-C₆-Alkylgruppen ein oder mehrere Substituenten,
ausgewählt unter C₁-C₄-Alkoxy und/oder Hydroxy aufweisen
können: z.B. Acetylmethyl (=2-Oxopropyl), 2-(Acetyl)ethyl
(=3-Oxo-n-butyl), 3-Oxo-n-pentyl, 1,1-Dimethyl-2-oxopropyl,
 - 10 3-Hydroxy-2-oxopropyl oder 3-Hydroxy-2-oxobutyl.
-
- C₃-C₆-Alkenyl, sowie die Alkenylteile von
 - C₃-C₆-Alkenylcarbonyl, C₃-C₆-Alkenyloxy,
 - C₃-C₆-Alkenyloxycarbonyl, C₃-C₆-Alkenylaminocarbonyl,
 - 15 N-(C₃-C₆-Alkenyl)-N-(C₁-C₆-alkylaminocarbonyl,
 - N-(C₃-C₆-Alkenyl)-N-(C₁-C₆-alkoxy)aminocarbonyl: z.B.
 - Prop-2-en-1-yl, But-1-en-4-yl, 1-Methyl-prop-2-en-1-yl,
 - 2-Methyl-prop-2-en-1-yl, 2-Buten-1-yl, 1-Penten-3-yl,
 - 1-Penten-4-yl, 2-Penten-4-yl, 1-Methyl-but-2-en-1-yl,
 - 20 2-Methyl-but-2-en-1-yl, 3-Methyl-but-2-en-1-yl,
 - 1-Methyl-but-3-en-1-yl, 2-Methyl-but-3-en-1-yl,
 - 3-Methyl-but-3-en-1-yl, 1,1-Dimethyl-prop-2-en-1-yl,
 - 1,2-Dimethyl-prop-2-en-1-yl, 1-Ethyl-prop-2-en-1-yl,
 - Hex-3-en-1-yl, Hex-4-en-1-yl, Hex-5-en-1-yl,
 - 25 1-Methyl-pent-3-en-1-yl, 2-Methyl-pent-3-en-1-yl,
 - 3-Methyl-pent-3-en-1-yl, 4-Methyl-pent-3-en-1-yl,
 - 1-Methyl-pent-4-en-1-yl, 2-Methyl-pent-4-en-1-yl,
 - 3-Methyl-pent-4-en-1-yl, 4-Methyl-pent-4-en-1-yl,
 - 1,1-Dimethyl-but-2-en-1-yl, 1,1-Dimethyl-but-3-en-1-yl,
 - 30 1,2-Dimethyl-but-2-en-1-yl, 1,2-Dimethyl-but-3-en-1-yl,
 - 1,3-Dimethyl-but-2-en-1-yl, 1,3-Dimethyl-but-3-en-1-yl,
 - 2,2-Dimethyl-but-3-en-1-yl, 2,3-Dimethyl-but-2-en-1-yl,
 - 2,3-Dimethyl-but-3-en-1-yl, 3,3-Dimethyl-but-2-en-1-yl,
 - 1-Ethyl-but-2-en-1-yl, 1-Ethyl-but-3-en-1-yl,
 - 35 2-Ethyl-but-2-en-1-yl, 2-Ethyl-but-3-en-1-yl,
 - 1,1,2-Trimethyl-prop-2-en-1-yl,
 - 1-Ethyl-1-methyl-prop-2-en-1-yl oder
 - 1-Ethyl-2-methyl-prop-2-en-1-yl;
-
- 40 - C₂-C₆-Alkenyl, sowie die Alkenylteile von
 - C₂-C₆-Alkenylcarbonyl, Phenyl-C₂-C₆-alkenylcarbonyl und
 - Heterocyclyl-C₂-C₆-alkenylcarbonyl: C₃-C₆-Alkenyl, wie
 - voranstehend genannt, sowie Ethenyl;
-
- 45 - C₃-C₆-Halogenalkenyl: einen C₃-C₆-Alkenylrest, wie vorstehend
 - genannt, der partiell oder vollständig durch Fluor, Chlor,
 - Brom und/oder Iod substituiert ist, also z.B. 2-Chlorallyl,

25

3-Chlorallyl, 2,3-Dichlorallyl, 3,3-Dichlorallyl,
2,3,3-Tri-chlorallyl, 2,3-Dichlorbut-2-enyl, 2-Bromallyl,
3-Bromallyl, 2,3-Dibromallyl, 3,3-Dibromallyl,
2,3,3-Tribromallyl oder 2,3-Dibrombut-2-enyl;

5

- C₃-C₆-Alkynyl, sowie die Alkynylteile von
C₃-C₆-Alkynylcarbonyl, C₃-C₆-Alkynyloxy,
C₃-C₆-Alkynyloxycarbonyl, C₃-C₆-Alkynylaminocarbonyl,
N-(C₃-C₆-Alkynyl)-N-(C₁-C₆-alkyl)-aminocarbonyl,
10 N-(C₃-C₆-Alkynyl)-N-(C₁-C₆-alkoxyaminocarbonyl: z.B.
Propargyl, But-1-in-3-yl, But-1-in-4-yl, But-2-in-1-yl,

Pent-1-in-3-yl, Pent-1-in-4-yl, Pent-1-in-5-yl,
Pent-2-in-1-yl, Pent-2-in-4-yl, Pent-2-in-5-yl,
3-Methyl-but-1-in-3-yl, 3-Methyl-but-1-in-4-yl,
15 Hex-1-in-3-yl, Hex-1-in-4-yl, Hex-1-in-5-yl, Hex-1-in-6-yl,
Hex-2-in-1-yl, Hex-2-in-4-yl, Hex-2-in-5-yl, Hex-2-in-6-yl,
Hex-3-in-1-yl, Hex-3-in-2-yl, 3-Methyl-pent-1-in-3-yl,
3-Methyl-pent-1-in-4-yl, 3-Methyl-pent-1-in-5-yl,
4-Methyl-pent-2-in-4-yl oder 4-Methyl-pent-2-in-5-yl;

20

- C₂-C₆-Alkynyl, sowie die Alkynylteile von
C₂-C₆-Alkynylcarbonyl: C₃-C₆-Alkynyl, wie voranstehend
genannt, sowie Ethinyl;

- 25 - C₃-C₆-Halogenalkynyl: einen C₃-C₆-Alkynylrest, wie vorstehend
genannt, der partiell oder vollständig durch Fluor, Chlor,
Brom und/oder Iod substituiert ist, also z.B.

1,1-Difluor-prop-2-in-1-yl, 3-Iod-prop-2-in-1-yl,
4-Fluorbut-2-in-1-yl, 4-Chlorbut-2-in-1-yl,

30

1,1-Difluorbut-2-in-1-yl, 4-Iod-but-3-in-1-yl,
5-Fluorpent-3-in-1-yl, 5-Iod-pent-4-in-1-yl,
6-Fluor-hex-4-in-1-yl oder 6-Iod-hex-5-in-1-yl;

- C₁-C₆-Alkandiyl: Methandiyl, Ethan-1,1-diyl, Ethan-1,2-diyl,
35 Propan-1,1-diyl, Propan-1,2-diyl, Propan-1,3-diyl,
Propan-2,2-diyl, Butan-1,1-diyl, Butan-1,2-diyl,

Butan-1,3-diyl, Butan-1,4-diyl, 2-Methyl-propan-1,3-diyl,
2-Methyl-propan-1,2-diyl, 2-Methyl-propan-1,1-diyl,
1-Methyl-propan-1,2-diyl, 1-Methyl-propan-2,2-diyl,

40

1-Methyl-propan-1,1-diyl, Pentan-1,1-diyl, Pentan-1,2-diyl,
Pentan-1,3-diyl, Pentan-1,5-diyl, Pentan-2,3-diyl,
Pentan-2,2-diyl, 1-Methyl-butan-1,1-diyl,

1-Methyl-butan-1,2-diyl, 1-Methyl-butan-1,3-diyl,

1-Methyl-butan-1,4-diyl, 2-Methyl-butan-1,1-diyl,

45

2-Methyl-butan-1,2-diyl, 2-Methyl-butan-1,3-diyl,

2-Methyl-butan-1,4-diyl, 2,2-Dimethyl-propan-1,1-diyl,

2,2-Dimethyl-propan-1,3-diyl, 1,1-Dimethyl-propan-1,3-diyl,

26

- 1,1-Dimethyl-propan-1,2-diyl, 2,3-Dimethyl-propan-1,3-diyl,
 2,3-Dimethyl-propan-1,2-diyl, 1,3-Dimethyl-propan-1,3-diyl,
 Hexan-1,1-diyl, Hexan-1,2-diyl, Hexan-1,3-diyl,
 Hexan-1,4-diyl-, Hexan-1,5-diyl, Hexan-1,6-diyl,
 5 Hexan-2,5-diyl, 2-Methyl-pentan-1,1-diyl,
 1-Methyl-pentan-1,2-diyl, 1-Methyl-pentan-1,3-diyl,
 1-Methyl-pentan-1,4-diyl, 1-Methyl-pentan-1,5-diyl,
 2-Methyl-pentan-1,1-diyl, 2-Methyl-pentan-1,2-diyl,
 2-Methyl-pentan-1,3-diyl, 2-Methyl-pentan-1,4-diyl,
 10 2-Methyl-pentan-1,5-diyl, 3-Methyl-pentan-1,1-diyl,
 3-Methyl-pentan-1,2-diyl, 3-Methyl-pentan-1,3-diyl,
 3-Methyl-pentan-1,4-diyl, 3-Methyl-pentan-1,5-diyl,
 1,1-Dimethyl-butan-1,2-diyl, 1,1-Dimethyl-butan-1,3-diyl,
 1,1-Dimethyl-butan-1,4-diyl, 1,2-Dimethyl-butan-1,1-diyl,
 15 1,2-Dimethyl-butan-1,2-diyl, 1,2-Dimethyl-butan-1,3-diyl,
 1,2-Dimethyl-butan-1,4-diyl, 1,3-Dimethyl-butan-1,1-diyl,
 1,3-Dimethyl-butan-1,2-diyl, 1,3-Dimethyl-butan-1,3-diyl,
 1,3-Dimethyl-butan-1,4-diyl, 1-Ethyl-butan-1,1-diyl,
 1-Ethyl-butan-1,2-diyl, 1-Ethyl-butan-1,3-diyl,
 20 1-Ethyl-butan-1,4-diyl, 2-Ethyl-butan-1,1-diyl,
 2-Ethyl-butan-1,2-diyl, 2-Ethyl-butan-1,3-diyl,
 2-Ethyl-butan-1,4-diyl, 2-Ethyl-butan-2,3-diyl,
 2,2-Dimethyl-butan-1,1-diyl, 2,2-Dimethyl-butan-1,3-diyl,
 2,2-Dimethyl-butan-1,4-diyl, 1-Isopropyl-propan-1,1-diyl,
 25 1-Isopropyl-propan-1,2-diyl, 1-Isopropyl-propan-1,3-diyl,
 2-Isopropyl-propan-1,1-diyl, 2-Isopropyl-propan-1,2-diyl,
 2-Isopropyl-propan-1,3-diyl, 1,2,3-Trimethyl-propan-1,1-diyl,
 1,2,3-Trimethyl-propan-1,2-diyl oder
 1,2,3-Trimethyl-propan-1,3-diyl;
 30 - C₂-C₆-Alkendiyl: Ethen-1,1-diyl, Ethen-1,2-diyl,
 1-Propen-1,1-diyl, 1-Propen-1,2-diyl, 1-Propen-1,3-diyl,
 2-Propen-1,1-diyl, 2-Propen-1,2-diyl, 2-Propen-1,3-diyl,
 1-Buten-1,1-diyl, 1-Buten-1,2-diyl, 1-Buten-1,3-diyl,
 35 1-Buten-1,4-diyl, 2-Buten-1,1-diyl, 2-Buten-1,2-diyl,
 2-Buten-1,3-diyl, 2-Buten-1,4-diyl, 3-Buten-1,1-diyl,
 3-Buten-1,2-diyl, 3-Buten-1,3-diyl, 3-Buten-1,4-diyl,
 1-Methyl-1-propen-1,2-diyl, 1-Methyl-1-propen-1,3-diyl,
 1-Methyl-2-propen-1,1-diyl, 1-Methyl-2-propen-1,2-diyl,
 40 1-Methyl-2-propen-1,3-diyl, 2-Methyl-1,1-propen-1,1-diyl,
 2-Methyl-1-propen-1,3-diyl, 3-Buten-1,1-diyl,
 3-Buten-1,2-diyl, 3-Buten-1,3-diyl, 3-Buten-1,4-diyl,
 1-Penten-1,1-diyl, 1-Penten-1,2-diyl, 1-Penten-1,3-diyl,
 1-Penten-1,4-diyl, 1-Penten-1,5-diyl, 1-Hexen-1,1-diyl,
 45 1-Hexen-1,2-diyl, 1-Hexen-1,3-diyl, 1-Hexen-1,4-diyl,
 1-Hexen-1,5-diyl oder 1-Hexen-1,6-diyl;

27

- C₂-C₆-Alkadiendiyl: 1,3-Butadien-1,1-diyl,
1,3-Butadien-1,2-diyl, 1,3-Butadien-1,3-diyl,
1,3-Butadien-1,4-diyl, 1,3-Pentadien-1,1-diyl,
1,3-Pentadien-1,2-diyl, 1,3-Pentadien-1,3-diyl,
5 1,3-Pentadien-1,4-diyl, 1,3-Pentadien-1,5-diyl,
2,4-Pentadien-1,1-diyl, 2,4-Pentadien-1,2-diyl,
2,4-Pentadien-1,3-diyl, 2,4-Pentadien-1,4-diyl,
2,4-Pentadien-1,5-diyl, 1-Methyl-1,3-butadien-1,4-diyl,
1,3-Hexadien-1,1-diyl, 1,3-Hexadien-1,2-diyl,
10 1,3-Hexadien-1,3-diyl, 1,3-Hexadien-1,4-diyl,
1,3-Hexadien-1,5-diyl, 1,3-Hexadien-1,6-diyl,
1-Methyl-1,3-pentadien-1,2-diyl,
1-Methyl-1,3-pentadien-1,3-diyl,
1-Methyl-1,3-pentadien-1,4-diyl oder
15 1-Methyl-1,3-pentadien-1,5-diyl;
- C₂-C₆-Alkindiyl: Ethin-1,2-diyl, 1-Propin-1,3-diyl,
2-Propin-1,1-diyl, 2-Propin-1,3-diyl, 1-Butin-1,3-diyl,
1-Butin-1,4-diyl, 2-Butin-1,1-diyl, 2-Butin-1,4-diyl,
20 1-Methyl-2-propin-1,1-diyl, 1-Methyl-2-propin-1,3-diyl,
1-Pentin-1,3-diyl, 1-Pentin-1,4-diyl, 1-Pentin-1,5-diyl,
2-Pentin-1,1-diyl, 2-Pentin-1,4-diyl, 2-Pentin-1,5-diyl,
3-Pentin-1,1-diyl, 3-Pentin-1,2-diyl, 3-Pentin-1,5-diyl,
4-Pentin-1,1-diyl, 4-Pentin-1,2-diyl, 4-Pentin-1,3-diyl,
25 4-Pentin-1,5-diyl, 1-Hexin-1,3-diyl, 1-Hexin-1,4-diyl,
1-Hexin-1,5-diyl, 1-Hexin-1,6-diyl, 2-Hexin-1,1-diyl,
2-Hexin-1,4-diyl, 2-Hexin-1,5-diyl, 2-Hexin-1,6-diyl,
3-Hexin-1,1-diyl, 3-Hexin-1,2-diyl, 3-Hexin-1,5-diyl,
3-Hexin-1,6-diyl, 4-Hexin-1,1-diyl, 4-Hexin-1,2-diyl,
30 4-Hexin-1,3-diyl, 4-Hexin-1,6-diyl, 5-Hexin-1,1-diyl,
5-Hexin-1,2-diyl, 5-Hexin-1,3-diyl, 5-Hexin-1,4-diyl oder
5-Hexin-1,6-diyl;
- C₃-C₆-Cycloalkyl, sowie die Cycloalkylteile von
35 C₃-C₆-Cycloalkylamino und C₃-C₆-Cycloalkylcarbonyl: z.B.
Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl oder Cyclohexyl;
- Heterocyclyl, sowie Heterocyclylteile von Heterocyclyloxy,
Heterocyclylcarbonyl, Heterocyclyl-C₁-C₄-alkyl,
40 Heterocyclyl-C₁-C₆-alkyl, Heterocyclylsulfonyl oder
Heterocyclloxysulfonyl, Heterocyclloxycarbonyl,
Heterocyclloxythiocarbonyl,
Heterocyclyl-C₂-C₆-alkenylcarbonyl,
Heterocyclylcarbonyl-C₁-C₆-alkyl,
45 N-(C₁-C₆-Alkyl)-N-(heterocyclyl)-aminocarbonyl,
Heterocyclylaminocarbonyl: ein gesättigter, partiell
gesättigter oder ungesättigter 5- oder 6-gliedriger,

28

heterocyclischer Ring, der ein, zwei, drei oder vier gleiche oder verschiedene Heteroatome, ausgewählt aus folgender Gruppe: Sauerstoff, Schwefel oder Stickstoff, enthält, also z.B. C-gebundene 5-gliedrige Ringe wie:

5

Tetrahydrofuran-2-yl, Tetrahydrofuran-3-yl,
Tetrahydrothien-2-yl, Tetrahydrothien-3-yl,
Tetrahydropyrrol-2-yl, Tetrahydropyrrol-3-yl,
2,3-Dihydrofuran-2-yl, 2,3-Dihydrofuran-3-yl,

10

2,5-Dihydrofuran-2-yl, 2,5-Dihydrofuran-3-yl,
4,5-Dihydrofuran-2-yl, 4,5-Dihydrofuran-3-yl,
2,3-Dihydrothien-2-yl, 2,3-Dihydrothien-3-yl,
2,5-Dihydrothien-2-yl, 2,5-Dihydrothien-3-yl,
4,5-Dihydrothien-2-yl, 4,5-Dihydrothien-3-yl,

15

2,3-Dihydro-1H-pyrrol-2-yl, 2,3-Dihydro-1H-pyrrol-3-yl,
2,5-Dihydro-1H-pyrrol-2-yl, 2,5-Dihydro-1H-pyrrol-3-yl,
4,5-Dihydro-1H-pyrrol-2-yl, 4,5-Dihydro-1H-pyrrol-3-yl,
3,4-Dihydro-2H-pyrrol-2-yl, 3,4-Dihydro-2H-pyrrol-3-yl,
3,4-Dihydro-5H-pyrrol-2-yl, 3,4-Dihydro-5H-pyrrol-3-yl,

20

2-Furyl, 3-Furyl, 2-Thienyl, 3-Thienyl, Pyrrol-2-yl,
Pyrrol-3-yl, Tetrahydropyrazol-3-yl, Tetrahydropyrazol-4-yl,
Tetrahydroisoxazol-3-yl, Tetrahydroisoxazol-4-yl,
Tetrahydroisoxazol-5-yl, 1,2-Oxathiolan-3-yl,
1,2-Oxathiolan-4-yl, 1,2-Oxathiolan-5-yl,

25

Tetrahydroisothiazol-3-yl, Tetrahydroisothiazol-4-yl,
Tetrahydroisothiazol-5-yl, 1,2-Dithiolan-3-yl,
1,2-Dithiolan-4-yl, Tetrahydroimidazol-2-yl,
Tetrahydroimidazol-4-yl, Tetrahydrooxazol-2-yl,
Tetrahydrooxazol-4-yl, Tetrahydrooxazol-5-yl,

30

Tetrahydrothiazol-2-yl, Tetrahydrothiazol-4-yl,
Tetrahydrothiazol-5-yl, 1,3-Dioxolan-2-yl,
1,3-Dioxolan-4-yl, 1,3-Oxathiolan-2-yl, 1,3-Oxathiolan-4-yl,
1,3-Oxathiolan-5-yl, 1,3-Dithiolan-2-yl, 1,3-Dithiolan-4-yl,

35

4,5-Dihydro-1H-pyrazol-3-yl, 4,5-Dihydro-1H-pyrazol-4-yl,
4,5-Dihydro-1H-pyrazol-5-yl, 2,5-Dihydro-1H-pyrazol-3-yl,
2,5-Dihydro-1H-pyrazol-4-yl, 2,5-Dihydro-1H-pyrazol-5-yl,
4,5-Dihydroisoxazol-3-yl, 4,5-Dihydroisoxazol-4-yl,
4,5-Dihydroisoxazol-5-yl, 2,5-Dihydroisoxazol-3-yl,
2,5-Dihydroisoxazol-4-yl, 2,5-Dihydroisoxazol-5-yl,

40

2,3-Dihydroisoxazol-3-yl, 2,3-Dihydroisoxazol-4-yl,
2,3-Dihydroisoxazol-5-yl, 4,5-Dihydroisothiazol-3-yl,
4,5-Dihydroisothiazol-4-yl, 4,5-Dihydroisothiazol-5-yl,
2,5-Dihydroisothiazol-3-yl, 2,5-Dihydroisothiazol-4-yl,
2,5-Dihydroisothiazol-5-yl, 2,3-Dihydroisothiazol-3-yl,

45

2,3-Dihydroisothiazol-4-yl, 2,3-Dihydroisothiazol-5-yl,
Δ³-1,2-Dithiol-3-yl, Δ³-1,2-Dithiol-4-yl,
Δ³-1,2-Dithiol-5-yl, 4,5-Dihydro-1H-imidazol-2-yl,

29

- 4,5-Dihydro-1H-imidazol-4-yl, 4,5-Dihydro-1H-imidazol-5-yl,
 2,5-Dihydro-1H-imidazol-2-yl, 2,5-Dihydro-1H-imidazol-4-yl,
 2,5-Dihydro-1H-imidazol-5-yl, 2,3-Dihydro-1H-imidazol-2-yl,
 2,3-Dihydro-1H-imidazol-4-yl, 4,5-Dihydrooxazol-2-yl,
 5 4,5-Dihydrooxazol-4-yl, 4,5-Dihydrooxazol-5-yl,
 2,5-Dihydrooxazol-2-yl, 2,5-Dihydrooxazol-4-yl,
 2,5-Dihydrooxazol-5-yl, 2,3-Dihydrooxazol-2-yl,
 2,3-Dihydrooxazol-4-yl, 2,3-Dihydrooxazol-5-yl,
 4,5-Dihydrothiazol-2-yl, 4,5-Dihydrothiazol-4-yl,
 10 4,5-Dihydrothiazol-5-yl, 2,5-Dihydrothiazol-2-yl,
 2,5-Dihydrothiazol-4-yl, 2,5-Dihydrothiazol-5-yl,
 2,3-Dihydrothiazol-2-yl, 2,3-Dihydrothiazol-4-yl,
 2,3-Dihydrothiazol-5-yl, 1,3-Dioxol-2-yl, 1,3-Dioxol-4-yl,
 1,3-Dithiol-2-yl, 1,3-Dithiol-4-yl, 1,3-Oxathiol-2-yl,
 15 1,3-Oxathiol-4-yl, 1,3-Oxathiol-5-yl, Pyrazol-3-yl,
 Pyrazol-4-yl, Isoxazol-3-yl, Isoxazol-4-yl, Isoxazol-5-yl,
 Isothiazol-3-yl, Isothiazol-4-yl, Isothiazol-5-yl,
 Imidazol-2-yl, Imidazol-4-yl, Oxazol-2-yl, Oxazol-4-yl,
 Oxazol-5-yl, Thiazol-2-yl, Thiazol-4-yl, Thiazol-5-yl,
 20 1,2,3- Δ^2 -Oxadiazolin-4-yl, 1,2,3- Δ^2 -Oxadiazolin-5-yl,
 1,2,4- Δ^4 -Oxadiazolin-3-yl, 1,2,4- Δ^4 -Oxadiazolin-5-yl,
 1,2,4- Δ^2 -Oxadiazolin-3-yl, 1,2,4- Δ^2 -Oxadiazolin-5-yl,
 1,2,4- Δ^3 -Oxadiazolin-3-yl, 1,2,4- Δ^3 -Oxadiazolin-5-yl,
 1,3,4- Δ^2 -Oxadiazolin-2-yl, 1,3,4- Δ^2 -Oxadiazolin-5-yl,
 25 1,3,4- Δ^3 -Oxadiazolin-2-yl, 1,3,4-Oxadiazolin-2-yl,
 1,2,4- Δ^4 -Thiadiazolin-3-yl, 1,2,4- Δ^4 -Thiadiazolin-5-yl,
 1,2,4- Δ^3 -Thiadiazolin-3-yl, 1,2,4- Δ^3 -Thiadiazolin-5-yl,
 1,2,4- Δ^2 -Thiadiazolin-3-yl, 1,2,4- Δ^2 -Thiadiazolin-5-yl,
 1,3,4- Δ^2 -Thiadiazolin-2-yl, 1,3,4- Δ^2 -Thiadiazolin-5-yl,
 30 1,3,4- Δ^3 -Thiadiazolin-2-yl, 1,3,4-Thiadiazolin-2-yl,
 1,3,2-Dioxathiolan-4-yl, 1,2,3- Δ^2 -Triazolin-4-yl,
 1,2,3- Δ^2 -Triazolin-5-yl, 1,2,4- Δ^2 -Triazolin-3-yl,
 1,2,4- Δ^2 -Triazolin-5-yl, 1,2,4- Δ^3 -Triazolin-3-yl,
 1,2,4- Δ^3 -Triazolin-5-yl, 1,2,4- Δ^1 -Triazolin-2-yl,
 35 1,2,4-Triazolin-3-yl, 3H-1,2,4-Dithiazol-5-yl,
 2H-1,3,4-Dithiazol-5-yl, 2H-1,3,4-Oxathiazol-5-yl,
 1,2,3-Oxadiazol-4-yl, 1,2,3-Oxadiazol-5-yl,
 1,2,4-Oxadiazol-3-yl, 1,2,4-Oxadiazol-5-yl,
 1,3,4-Oxadiazol-2-yl, 1,2,3-Thiadiazol-4-yl,
 40 1,2,3-Thiadiazol-5-yl, 1,2,4-Thiadiazol-3-yl,
 1,2,4-Thiadiazol-5-yl, 1,3,4-Thiadiazolyl-2-yl,
 1,2,3-Triazol-4-yl, 1,2,4-Triazol-3-yl, Tetrazol-5-yl;

C-gebundene 6-gliedrige Ringe wie:

30

- Tetrahydropyran-2-yl, Tetrahydropyran-3-yl,
Tetrahydropyran-4-yl, Piperidin-2-yl, Piperidin-3-yl,
Piperidin-4-yl, Tetrahydrothiopyran-2-yl,
Tetrahydrothiopyran-3-yl, Tetrahydrothiopyran-4-yl,
5 2H-3,4-Dihydropyran-6-yl, 2H-3,4-Dihydropyran-5-yl,
2H-3,4-Dihydropyran-4-yl, 2H-3,4-Dihydropyran-3-yl,
2H-3,4-Dihydropyran-2-yl, 2H-3,4-Dihydropyran-6-yl,
2H-3,4-Dihydrothiopyran-5-yl, 2H-3,4-Dihydrothiopyran-4-yl,
2H-3,4-Dihydropyran-3-yl, 2H-3,4-Dihydropyran-2-yl,
10 1,2,3,4-Tetrahydropyridin-6-yl,
1,2,3,4-Tetrahydropyridin-5-yl,
1,2,3,4-Tetrahydropyridin-4-yl,
1,2,3,4-Tetrahydropyridin-3-yl,
1,2,3,4-Tetrahydropyridin-2-yl, 2H-5,6-Dihydropyran-2-yl,
15 2H-5,6-Dihydropyran-3-yl, 2H-5,6-Dihydropyran-4-yl,
2H-5,6-Dihydropyran-5-yl, 2H-5,6-Dihydropyran-6-yl,
2H-5,6-Dihydrothiopyran-2-yl, 2H-5,6-Dihydrothiopyran-3-yl,
2H-5,6-Dihydrothiopyran-4-yl, 2H-5,6-Dihydrothiopyran-5-yl,
2H-5,6-Dihydrothiopyran-6-yl, 1,2,5,6-Tetrahydropyridin-2-yl,
20 1,2,5,6-Tetrahydropyridin-3-yl,
1,2,5,6-Tetrahydropyridin-4-yl,
1,2,5,6-Tetrahydropyridin-5-yl,
1,2,5,6-Tetrahydropyridin-6-yl,
2,3,4,5-Tetrahydropyridin-2-yl,
25 2,3,4,5-Tetrahydropyridin-3-yl,
2,3,4,5-Tetrahydropyridin-4-yl,
2,3,4,5-Tetrahydropyridin-5-yl,
2,3,4,5-Tetrahydropyridin-6-yl, 4H-Pyran-2-yl, 4H-Pyran-3-yl,
4H-Pyran-4-yl, 4H-Thiopyran-2-yl, 4H-Thiopyran-3-yl,
30 4H-Thiopyran-4-yl, 1,4-Dihydropyridin-2-yl,
1,4-Dihydropyridin-3-yl, 1,4-Dihydropyridin-4-yl,
2H-Pyran-2-yl, 2H-Pyran-3-yl, 2H-Pyran-4-yl, 2H-Pyran-5-yl,
2H-Pyran-6-yl, 2H-Thiopyran-2-yl, 2H-Thiopyran-3-yl,
2H-Thiopyran-4-yl, 2H-Thiopyran-5-yl, 2H-Thiopyran-6-yl,
35 1,2-Dihydropyridin-2-yl, 1,2-Dihydropyridin-3-yl,
1,2-Dihydropyridin-4-yl, 1,2-Dihydropyridin-5-yl,
1,2-Dihydropyridin-6-yl, 3,4-Dihydropyridin-2-yl,
3,4-Dihydropyridin-3-yl, 3,4-Dihydropyridin-4-yl,
3,4-Dihydropyridin-5-yl, 3,4-Dihydropyridin-6-yl,
40 2,5-Dihydropyridin-2-yl, 2,5-Dihydropyridin-3-yl,
2,5-Dihydropyridin-4-yl, 2,5-Dihydropyridin-5-yl,
2,5-Dihydropyridin-6-yl, 2,3-Dihydropyridin-2-yl,
2,3-Dihydropyridin-3-yl, 2,3-Dihydropyridin-4-yl,
2,3-Dihydropyridin-5-yl, 2,3-Dihydropyridin-6-yl,
45 Pyridin-2-yl, Pyridin-3-yl, Pyridin-4-yl, 1,3-Dioxan-2-yl,
1,3-Dioxan-4-yl, 1,3-Dioxan-5-yl, 1,4-Dioxan-2-yl,
1,3-Dithian-2-yl, 1,3-Dithian-4-yl, 1,3-Dithian-5-yl,

31

- 1,4-Dithian-2-yl, 1,3-Oxathian-2-yl, 1,3-Oxathian-4-yl,
1,3-Oxathian-5-yl, 1,3-Oxathian-6-yl, 1,4-Oxathian-2-yl,
1,4-Oxathian-3-yl, 1,2-Dithian-3-yl, 1,2-Dithian-4-yl,
Hexahydropyrimidin-2-yl, Hexahydropyrimidin-4-yl,
5 Hexahydropyrimidin-5-yl, Hexahydropyrazin-2-yl,
Hexahydropyridazin-3-yl, Hexahydropyridazin-4-yl,
Tetrahydro-1,3-oxazin-2-yl, Tetrahydro-1,3-oxazin-4-yl,
Tetrahydro-1,3-oxazin-5-yl, Tetrahydro-1,3-oxazin-6-yl,
Tetrahydro-1,3-thiazin-2-yl, Tetrahydro-1,3-thiazin-4-yl,
10 Tetrahydro-1,3-thiazin-5-yl, Tetrahydro-1,3-thiazin-6-yl,
Tetrahydro-1,4-thiazin-2-yl, Tetrahydro-1,4-thiazin-3-yl,
Tetrahydro-1,4-oxazin-2-yl, Tetrahydro-1,4-oxazin-3-yl,
Tetrahydro-1,2-oxazin-3-yl, Tetrahydro-1,2-oxazin-4-yl,
Tetrahydro-1,2-oxazin-5-yl, Tetrahydro-1,2-oxazin-6-yl,
15 2H-5,6-Dihydro-1,2-oxazin-3-yl,
2H-5,6-Dihydro-1,2-oxazin-4-yl,
2H-5,6-Dihydro-1,2-oxazin-5-yl,
2H-5,6-Dihydro-1,2-oxazin-6-yl,
2H-5,6-Dihydro-1,2-thiazin-3-yl,
20 2H-5,6-Dihydro-1,2-thiazin-4-yl,
2H-5,6-Dihydro-1,2-thiazin-5-yl,
2H-5,6-Dihydro-1,2-thiazin-6-yl,
4H-5,6-Dihydro-1,2-oxazin-3-yl,
4H-5,6-Dihydro-1,2-oxazin-4-yl,
25 4H-5,6-Dihydro-1,2-oxazin-5-yl,
4H-5,6-Dihydro-1,2-oxazin-6-yl,
4H-5,6-Dihydro-1,2-thiazin-3-yl,
4H-5,6-Dihydro-1,2-thiazin-4-yl,
4H-5,6-Dihydro-1,2-thiazin-5-yl,
30 4H-5,6-Dihydro-1,2-thiazin-6-yl,
2H-3,6-Dihydro-1,2-oxazin-3-yl,
2H-3,6-Dihydro-1,2-oxazin-4-yl,
2H-3,6-Dihydro-1,2-oxazin-5-yl,
2H-3,6-Dihydro-1,2-oxazin-6-yl,
35 2H-3,6-Dihydro-1,2-thiazin-3-yl,
2H-3,6-Dihydro-1,2-thiazin-4-yl,
2H-3,6-Dihydro-1,2-thiazin-5-yl,
2H-3,6-Dihydro-1,2-thiazin-6-yl,
2H-3,4-Dihydro-1,2-oxazin-3-yl,
40 2H-3,4-Dihydro-1,2-oxazin-4-yl,
2H-3,4-Dihydro-1,2-oxazin-5-yl,
2H-3,4-Dihydro-1,2-oxazin-6-yl,
2H-3,4-Dihydro-1,2-thiazin-3-yl,
2H-3,4-Dihydro-1,2-thiazin-4-yl,
45 2H-3,4-Dihydro-1,2-thiazin-5-yl,
2H-3,4-Dihydro-1,2-thiazin-6-yl,
2,3,4,5-Tetrahydropyridazin-3-yl,

32

- 2,3,4,5-Tetrahydropyridazin-4-yl,
2,3,4,5-Tetrahydropyridazin-5-yl,
2,3,4,5-Tetrahydropyridazin-6-yl,
3,4,5,6-Tetrahydropyridazin-3-yl,
5 3,4,5,6-Tetrahydropyridazin-4-yl,
1,2,5,6-Tetrahydropyridazin-3-yl,
1,2,5,6-Tetrahydropyridazin-4-yl,
1,2,5,6-Tetrahydropyridazin-5-yl,
1,2,5,6-Tetrahydropyridazin-6-yl,
10 1,2,3,6-Tetrahydropyridazin-3-yl,
1,2,3,6-Tetrahydropyridazin-4-yl,
4H-5,6-Dihydro-1,3-oxazin-2-yl,
4H-5,6-Dihydro-1,3-oxazin-4-yl,
4H-5,6-Dihydro-1,3-oxazin-5-yl,
15 4H-5,6-Dihydro-1,3-oxazin-6-yl,
4H-5,6-Dihydro-1,3-thiazin-2-yl,
4H-5,6-Dihydro-1,3-thiazin-4-yl,
4H-5,6-Dihydro-1,3-thiazin-5-yl,
4H-5,6-Dihydro-1,3-thiazin-6-yl,
20 3,4,5,6-Tetrahydropyrimidin-2-yl,
3,4,5,6-Tetrahydropyrimidin-4-yl,
3,4,5,6-Tetrahydropyrimidin-5-yl,
3,4,5,6-Tetrahydropyrimidin-6-yl,
1,2,3,4-Tetrahydropyrazin-2-yl,
25 1,2,3,4-Tetrahydropyrazin-5-yl,
1,2,3,4-Tetrahydropyrimidin-2-yl,
1,2,3,4-Tetrahydropyrimidin-4-yl,
1,2,3,4-Tetrahydropyrimidin-5-yl,
1,2,3,4-Tetrahydropyrimidin-6-yl,
30 2,3-Dihydro-1,4-thiazin-2-yl, 2,3-Dihydro-1,4-thiazin-3-yl,
2,3-Dihydro-1,4-thiazin-5-yl, 2,3-Dihydro-1,4-thiazin-6-yl,
2H-1,2-Oxazin-3-yl, 2H-1,2-Oxazin-4-yl, 2H-1,2-Oxazin-5-yl,
2H-1,2-Oxazin-6-yl, 2H-1,2-Thiazin-3-yl, 2H-1,2-Thiazin-4-yl,
2H-1,2-Thiazin-5-yl, 2H-1,2-Thiazin-6-yl, 4H-1,2-Oxazin-3-yl,
35 4H-1,2-Oxazin-4-yl, 4H-1,2-Oxazin-5-yl, 4H-1,2-Oxazin-6-yl,
4H-1,2-Thiazin-3-yl, 4H-1,2-Thiazin-4-yl,
4H-1,2-Thiazin-5-yl, 4H-1,2-Thiazin-6-yl, 6H-1,2-Oxazin-3-yl,
6H-1,2-Oxazin-4-yl, 6H-1,2-Oxazin-5-yl, 6H-1,2-Oxazin-6-yl,
6H-1,2-Thiazin-3-yl, 6H-1,2-Thiazin-4-yl,
40 6H-1,2-Thiazin-5-yl, 6H-1,2-Thiazin-6-yl, 2H-1,3-Oxazin-2-yl,
2H-1,3-Oxazin-4-yl, 2H-1,3-Oxazin-5-yl, 2H-1,3-Oxazin-6-yl,
2H-1,3-Thiazin-2-yl, 2H-1,3-Thiazin-4-yl,
2H-1,3-Thiazin-5-yl, 2H-1,3-Thiazin-6-yl, 4H-1,3-Oxazin-2-yl,
4H-1,3-Oxazin-4-yl, 4H-1,3-Oxazin-5-yl, 4H-1,3-Oxazin-6-yl,
45 4H-1,3-Thiazin-2-yl, 4H-1,3-Thiazin-4-yl,
4H-1,3-Thiazin-5-yl, 4H-1,3-Thiazin-6-yl, 6H-1,3-Oxazin-2-yl,
6H-1,3-Oxazin-4-yl, 6H-1,3-Oxazin-5-yl, 6H-1,3-Oxazin-6-yl,

33

- 6H-1,3-Thiazin-2-yl, 6H-1,3-Oxazin-4-yl, 6H-1,3-Oxazin-5-yl,
 6H-1,3-Thiazin-6-yl, 2H-1,4-Oxazin-2-yl, 2H-1,4-Oxazin-3-yl,
 2H-1,4-Oxazin-5-yl, 2H-1,4-Oxazin-6-yl, 2H-1,4-Thiazin-2-yl,
 2H-1,4-Thiazin-3-yl, 2H-1,4-Thiazin-5-yl,
 5 2H-1,4-Thiazin-6-yl, 4H-1,4-Oxazin-2-yl, 4H-1,4-Oxazin-3-yl,
 4H-1,4-Thiazin-2-yl, 4H-1,4-Thiazin-3-yl,
 1,4-Dihydropyridazin-3-yl, 1,4-Dihydropyridazin-4-yl,
 1,4-Dihydropyridazin-5-yl, 1,4-Dihydropyridazin-6-yl,
 1,4-Dihydropyrazin-2-yl, 1,2-Dihydropyrazin-2-yl,
 10 1,2-Dihydropyrazin-3-yl, 1,2-Dihydropyrazin-5-yl,
 1,2-Dihydropyrazin-6-yl, 1,4-Dihydropyrimidin-2-yl,
 1,4-Dihydropyrimidin-4-yl, 1,4-Dihydropyrimidin-5-yl,
 1,4-Dihydropyrimidin-6-yl, 3,4-Dihydropyrimidin-2-yl,
 3,4-Dihydropyrimidin-4-yl, 3,4-Dihydropyrimidin-5-yl,
 15 3,4-Dihydropyrimidin-6-yl, Pyridazin-3-yl, Pyridazin-4-yl,
 Pyrimidin-2-yl, Pyrimidin-4-yl, Pyrimidin-5-yl, Pyrazin-2-yl,
 1,3,5-Triazin-2-yl, 1,2,4-Triazin-3-yl, 1,2,4-Triazin-5-yl,
 1,2,4-Triazin-6-yl oder 1,2,4,5-Tetra-zin-3-yl;

20 N-gebundene 5-gliedrige Ringe wie:

- Tetrahydropyrrol-1-yl, 2,3-Dihydro-1H-pyrrol-1-yl,
 2,5-Dihydro-1H-pyrrol-1-yl, Pyrrol-1-yl,
 25 Tetrahydropyrazol-1-yl, Tetrahydroisoxazol-2-yl,
 Tetrahydroisothiazol-2-yl, Tetrahydroimidazol-1-yl,
 Tetrahydrooxazol-3-yl, Tetrahydrothiazol-3-yl,
 4,5-Dihydro-1H-pyrazol-1-yl, 2,5-Dihydro-1H-pyrazol-1-yl,
 2,3-Dihydro-1H-pyrazol-1-yl, 2,5-Dihydroisoxazol-2-yl,
 2,3-Dihydroisoxazol-2-yl, 2,5-Dihydroisothiazol-2-yl,
 30 2,3-Dihydroisoxazol-2-yl, 4,5-Dihydro-1H-imidazol-1-yl,
 2,5-Dihydro-1H-imidazol-1-yl, 2,3-Dihydro-1H-imidazol-1-yl,
 2,3-Dihydrooxazol-3-yl, 2,3-Dihydrothiazol-3-yl,
 Pyrazol-1-yl, Imidazol-1-yl, 1,2,4- Δ^4 -Oxadiazolin-2-yl,
 1,2,4- Δ^2 -Oxadiazolin-4-yl, 1,2,4- Δ^3 -Oxadiazolin-2-yl,
 35 1,3,4- Δ^2 -Oxadiazolin-4-yl, 1,2,4- Δ^5 -Thiadiazolin-2-yl,
 1,2,4- Δ^3 -Thiadiazolin-2-yl, 1,2,4- Δ^2 -Thiadiazolin-4-yl,
 1,3,4- Δ^2 -Thiadiazolin-4-yl, 1,2,3- Δ^2 -Triazolin-1-yl,
 1,2,4- Δ^2 -Triazolin-1-yl, 1,2,4- Δ^2 -Triazolin-4-yl,
 1,2,4- Δ^3 -Triazolin-1-yl, 1,2,4- Δ^1 -Triazolin-4-yl,
 40 1,2,3-Triazol-1-yl, 1,2,4-Triazol-1-yl, Tetrazol-1-yl;

N-gebundene 6-gliedrige Ringe wie:

- Piperidin-1-yl, 1,2,3,4-Tetrahydropyridin-1-yl,
 45 1,2,5,6-Tetrahydropyridin-1-yl, 1,4-Dihydropyridin-1-yl,
 1,2-Dihydropyridin-1-yl, Hexahydropyrimidin-1-yl,
 Hexahydropyrazin-1-yl, Hexahydropyridazin-1-yl,

34

- Tetrahydro-1,3-oxazin-3-yl, Tetrahydro-1,3-thiazin-3-yl,
 Tetrahydro-1,4-thiazin-4-yl, Tetrahydro-1,4-oxazin-4-yl
 (Morpholinyl), Tetrahydro-1,2-oxazin-2-yl,
 2H-5,6-Dihydro-1,2-oxazin-2-yl,
 5 2H-5,6-Dihydro-1,2-thiazin-2-yl,
 2H-3,6-Dihydro-1,2-oxazin-2-yl,
 2H-3,6-Dihydro-1,2-thiazin-2-yl,
 2H-3,4-Dihydro-1,2-thiazin-2-yl,
 2,3,4,5-Tetrahydropyridazin-2-yl,
 10 1,2,5,6-Tetrahydropyridazin-1-yl,
 1,2,5,6-Tetrahydropyridazin-2-yl,
 1,2,3,6-Tetrahydropyridazin-1-yl,
 3,4,5,6-Tetrahydropyrimidin-3-yl,
 1,2,3,4-Tetrahydropyrazin-1-yl,
 15 1,2,3,4-Tetrahydropyrimidin-1-yl,
 1,2,3,4-Tetrahydropyrimidin-3-yl,
 2,3-Dihydro-1,4-thiazin-4-yl, 2H-1,2-Oxazin-2-yl,
 2H-1,2-Thiazin-2-yl, 4H-1,4-Oxazin-4-yl, 4H-1,4-Thiazin-4-yl,
 1,4-Dihydropyridazin-1-yl, 1,4-Dihydropyrazin-1-yl,
 20 1,2-Dihydropyrazin-1-yl, 1,4-Dihydropyrimidin-1-yl oder
 3,4-Dihydropyrimidin-3-yl;

sowie N-gebundene cyclische Imide wie:

- 25 Phthalsäureimid, Tetrahydrophthalsäureimid, Succinimid,
 Maleinimid, Glutarimid, 5-Oxo-triazolin-1-yl,
 5-Oxo-1,3,4-oxadiazolin-4-yl oder
 2,4-Dioxo-(1H,3H)-pyrimidin-3-yl;
 30 wobei mit einem ankondensierten Phenylring oder mit einem
 C₃-C₆-Carbocyclus oder einem weiteren 5- bis 6-gliedrigen
 Heterocyclus ein bicyclisches Ringsystem ausgebildet werden
 kann,
 35 wobei gegebenenfalls der Schwefel der genannten Heterocyclen
 zu S=O oder S(=O)₂ oxidiert sein kann

- und wobei mit einem ankondensierten Phenylring oder mit einem
 C₃-C₆-Carbocyclus oder mit einem weiteren 5- bis 6-gliedrigen
 40 Heterocyclus ein bicyclisches Ringsystem ausgebildet werden
 kann.

Alle Phenylringe bzw. Heterocyclylreste sowie alle
 Phenylkomponenten in Phenoxy, Phenylalkyl, Phenylcarbonylalkyl,
 45 Phenylcarbonyl, Phenylalkenylcarbonyl, Phenoxycarbonyl,
 Phenyloxythiocarbonyl, Phenylaminocarbonyl und
 N-Alkyl-N-phenylaminocarbonyl, Phenylsulfonyl oder

- Phenoxysulfonyl bzw. Heterocyclylkomponenten in Heterocyclyloxy, Heterocyclylalkyl, Heterocyclylcarbonylalkyl, Heterocyclylcarbonyl, Heterocyclyloxythiocarbonyl, Heterocyclylalkenylcarbonyl, Heterocyclyloxycarbonyl, Heterocyclylaminocarbonyl, N-Alkyl-N-heterocyclylaminocarbonyl, Heterocyclylsulfonyl oder Heterocyclyloxysulfonyl sind, soweit nicht anders angegeben, vorzugsweise unsubstituiert oder tragen ein, zwei oder drei Halogenatome und/oder eine Nitrogruppe, einen Cyanorest und/oder einen oder zwei Methyl-, Trifluormethyl-, Methoxy- oder Trifluormethoxysubstituenten.
- Im Hinblick auf die Verwendung der erfindungsgemäßen Verbindungen der Formel I als Herbizide haben die Variablen X, Y, R¹ bis R¹⁶ vorzugsweise folgende Bedeutungen, und zwar jeweils für sich alleine oder in Kombination:

- 15 R¹ Wasserstoff, Halogen, C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Alkyloxy, C₁-C₆-Alkylthio, C₁-C₆-Alkylsulfinyl, C₁-C₆-Alkylsulfonyl, C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Alkoxyalkyl, C₁-C₆-Alkylsulfonyl-C₁-C₆-alkyl, besonders bevorzugt Methyl, Chlor, Methoxy, 20 Methylthio, Methylsulfinyl, Methylsulfonyl, Brommethyl, Methoxymethyl, Methylsulfonylmethyl;
- R² Wasserstoff, Halogen, z.B. Chlor oder Brom, 25 C₁-C₆-Alkyl, z.B. Methyl;
- X C-R³ mit den für R³ zuvor genannten Bedeutungen oder N;
- 30 Y S, SO₂ oder NR⁴ mit den für R⁴ zuvor genannten Bedeutungen;
- Pz Rest der allgemeinen Formel IIa, worin R⁸, R⁹ und R¹⁰ die zuvor genannten Bedeutungen haben.

35

Bevorzugt sind insbesondere Verbindungen der Formel I, worin Y für O, S, SO₂ oder N-R⁴ und X für C-R³ stehen. Bevorzugt sind auch Verbindungen der Formel I, worin X für N und Y für S oder N-R⁴ 40 stehen.

Bevorzugt haben R⁸, R⁹ und R¹⁰ unabhängig voneinander die folgenden Bedeutungen:

- 45 R⁸ Hydroxy, Halogen, OR¹¹, SR¹¹, SO₂R¹², OSO₂R¹², NR¹⁵R¹⁶, ONR¹⁵R¹⁶ oder N-gebundenes Heterocyclyl, das partiell oder vollständig halogeniert sein kann und/oder

36

- einen, zwei oder drei der folgenden Reste tragen kann: Nitro, Cyano, C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy oder C₁-C₄-Halogenalkoxy; insbesondere Hydroxy, OR¹¹ und OSO₂R¹², speziell Hydroxy,
- 5 C₁-C₄-Alkyloxy, O-CH₂-Phenyl, Phenylcarbonyloxy, 2-, 3- oder 4-Fluorphenylcarbonyloxy, Cyclopropylcarbonyloxy, C₁-C₄-Sulfonyloxy, Phenylsulfonyloxy und 2-, 3- oder 4-Methylphenylsulfonyloxy;
- 10 R⁹ C₁-C₆-Alkyl, insbesondere C₁-C₄-Alkyl, und
- R¹⁰ Wasserstoff oder C₁-C₄-Alkyl, insbesondere Wasserstoff oder C₁-C₄-Alkyl.
- 15 Bevorzugt sind auch Verbindungen, in denen R⁹ für C₃-C₆-Cycloalkyl, insbesondere Cyclopropyl steht.
- Besonders bevorzugt sind Verbindungen der allgemeinen Formel I, worin X für C-R³ steht und
- 20 R³ für Wasserstoff, Halogen, Cyano, Rhodano, C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Halogenalkoxy, C₁-C₆-Alkylthio, C₁-C₆-Halogenalkylthio, C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-alkyl,
- 25 Phenyl oder Pyridyl, wobei die zwei letztgenannten Reste teilweise oder vollständig halogeniert sein können und/oder einen, zwei oder drei, insbesondere einen der folgenden Reste: Halogen, C₁-C₄-Alkoxy,
- 30 C₁-C₄-Halogenalkyl, und C₁-C₄-Halogenalkoxy, tragen können;
- oder
- 35 COOR⁵ mit den für R⁵ zuvor genannten Bedeutungen steht. Hierin steht R⁵ insbesondere für Wasserstoff oder C₁-C₆-Alkyl und besonders bevorzugt für Wasserstoff, Methyl, Ethyl, n-Propyl, iso-Propyl, n-Butyl, 2-Butyl, iso-Butyl und tert.-Butyl.
- 40 Bevorzugt sind auch Verbindungen I, in denen R³ C₃-C₆-Cycloalkyl oder Phenoxy, das wie für Phenyl angegeben substituiert sein kann, bedeutet.
- 45 Beispiele für bevorzugte Reste R³ sind Wasserstoff, Fluor, Chlor, Brom, Cyano, Rhodano, Methyl, Ethyl, n-Propyl, Isopropyl, n-Butyl, 2-Butyl, Isobutyl, tert-Butyl, Chlormethyl, Dichlormethyl,

37

Trichlormethyl, Fluormethyl, Difluormethyl, Trifluormethyl, 2,2,2-Trifluorethyl, Methoxymethyl, Ethoxymethyl, Methoxy, Ethoxy, 1-Propoxy, 2-Propoxy, 1-Butoxy, 2-Butoxy, 2-Methylprop-1-oxy, tert-Butyloxy, Difluormethyloxy, Trifluormethyloxy, 5 2,2,2-Trifluorethyl-1-oxy, (Methoxy)methyloxy, Methylsulfanyl, Ethylsulfanyl, n-Propylsulfanyl, Isopropylsulfanyl, 1-Butylsulfanyl, 2-Butylsulfanyl, 2-Methylprop-1-ylsulfanyl, tert-Butylsulfanyl, Fluormethylsulfanyl, Trifluormethylsulfanyl, 2,2,2-Trifluorethyl-1-sulfanyl, 2-(Methylcarbonyl)ethyl, Phenyl, 2-, 3- oder 10 4-Fluorphenyl, 2-, 3- oder 4-Chlorphenyl, 2-, 3- oder 4-Hydroxyphenyl, 2-, 3- oder 4-Methoxyphenyl, 2-, 3- oder 4-(Trifluormethoxy)phenyl, 2-, 3- oder 4-(Difluormethoxy)phenyl, 2-, 3- oder 4-(Trifluormethyl)phenyl, 2-, 3- oder 4-Tolyl, 2-, 3- oder 4-Pyridinyl, 2-, 3- oder 4-Fluorphenoxy, 2-, 3- oder 4-Methoxyphenoxy, 2-, 3- oder 4-Trifluormethylphenoxy, 2-, 3- oder 4-Chlorphenoxy, Methoxycarbonyl, Ethoxycarbonyl, Trifluormethoxycarbonyl, Isopropoxycarbonyl, tert-Butoxycarbonyl und Phenoxy-carbonyl.

Ganz besonders bevorzugte Verbindungen der allgemeinen Formel I 20 mit $X = C-R^3$ sind solche Verbindungen, worin R^3 für Wasserstoff, Halogen, insbesondere Fluor oder Chlor, C_1-C_4 -Alkyl, C_1-C_4 -Halogenalkyl, insbesondere Fluormethyl, Difluormethyl, Trifluormethyl und 2,2,2-Trifluorethyl, oder für Phenyl oder Phenoxy steht, wobei Phenyl oder Phenoxy einen, zwei oder drei und insbesondere 25 einen Substituenten, ausgewählt unter C_1-C_4 -Alkyl, insbesondere Methyl, Halogen, insbesondere Fluor oder Chlor, C_1-C_4 -Alkoxy, insbesondere Methoxy, oder Halogenalkoxy, insbesondere Trifluormethoxy, tragen kann.

30 Unter den vorstehend genannten Pyrazolderivaten der allgemeinen Formel I sind solche Verbindungen besonders bevorzugt, die sich von der Benzothiazol-5-carbonsäure ableiten, also Verbindungen der allgemeinen Formel I, worin X für einen Rest $C-R^3$ steht und Y ausgewählt ist unter S, SO, und SO_2 . Unter den Pyrazol-Derivaten 35 des Benzothiazols sind wiederum solche bevorzugt, worin R^3 eine der zuvor als bevorzugt genannten Bedeutungen aufweist. Insbesondere steht Y für S oder SO_2 .

Erfindungsgemäß bevorzugt sind auch solche Pyrazolylderivate, die 40 sich von der Benzooxazol-5-carbonsäure ableiten, d.h. Verbindungen der allgemeinen Formel I, worin X für eine Gruppe $C-R^3$ mit den zuvor für R^3 angegebenen Bedeutungen und Y für ein Sauerstoffatom stehen. Hierunter sind wiederum solche Verbindungen bevorzugt, worin R^3 die zuvor als bevorzugt angegebenen Bedeutungen aufweist.

38

Ebenfalls bevorzugt sind Pyrazolderivate der allgemeinen Formel I, die sich von der Benzimidazol-5-carbonsäure ableiten, also Verbindungen der allgemeinen Formel I, worin X für C-R³ mit den für R³ zuvor genannten Bedeutungen und Y für eine Gruppe N-R⁴ mit den zuvor für R⁴ genannten Bedeutungen stehen. Hierunter sind solche Benzimidazolderivate der allgemeinen Formel I bevorzugt, worin R³ die zuvor als für R³ bevorzugt genannten Bedeutungen aufweist. Ferner sind Benzimidazol-Derivate der allgemeinen Formel I bevorzugt, worin R⁴ für Wasserstoff, C₁-C₆-Alkyl oder C₁-C₆-Halogenalkyl, insbesondere für Wasserstoff, Methyl, Ethyl, n-Propyl und iso-Propyl.

Erfindungsgemäß bevorzugt sind auch Pyrazolylderivate der Benzotriazol-5-carbonsäure, also Verbindungen der allgemeinen Formel I, worin X für Stickstoff und Y für eine Gruppe N-R⁴ mit den zuvor für R⁴ angegebenen Bedeutungen steht. Hierunter sind wiederum solche Verbindungen bevorzugt, worin R⁴ die zuvor als bevorzugt angegebenen Bedeutungen aufweist.

20 Erfindungsgemäß bevorzugt sind auch Pyrazolylderivate der Benzothiadiazol-5-carbonsäure, also Verbindungen der allgemeinen Formel I, worin X für N und Y für S steht. Ebenfalls bevorzugt sind Pyrazolderivate der Benzoisothiadiazolcarbonsäure, also Verbindungen der allgemeinen Formel I, worin X-Y für S=N steht und X 25 für S steht.

Unter den als bevorzugt angegebenen Pyrazolyl-Derivaten der allgemeinen Formel I sind wiederum solche Verbindungen bevorzugt, worin Pz in Formel I für eine Gruppe der allgemeinen Formel IIa 30 steht. Hierunter sind wiederum Verbindungen der allgemeinen Formel I besonders bevorzugt, worin die Variablen R⁸, R⁹ und R¹⁰ in Formel IIa für sich alleine, und besonders bevorzugt in Kombination miteinander, die folgenden Bedeutungen aufweisen:

35 R⁸ Hydroxy, Halogen, OR¹¹, SR¹¹, SO₂R¹², OSO₂R¹², NR¹⁵R¹⁶, ONR¹⁵R¹⁶ oder N-gebundenes Heterocyclyl, das partiell oder vollständig halogeniert sein kann und/oder einen, zwei oder drei der folgenden Reste tragen kann: Nitro, Cyano, C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, 40 C₁-C₄-Alkoxy oder C₁-C₄-Halogenalkoxy, insbesondere Hydroxy, OR¹¹ und OSO₂R¹²;

R⁹ C₁-C₄-Alkyl oder Cyclopropyl;

45 R¹⁰ Wasserstoff oder C₁-C₄-Alkyl.

39

Unter den Verbindungen der allgemeinen Formel I, worin Pz für einen Pyrazolylrest der allgemeinen Formel IIa steht, sind solche Verbindungen ganz besonders bevorzugt, worin die Variablen R⁸, R⁹ und R¹⁰ gemeinsam die folgenden Bedeutungen aufweisen:

5

R⁸ für Hydroxy, C₁-C₄-Alkyloxy, O-CH₂-Phenyl, Phenylcarbonyloxy, 2-, 3- oder 4-Fluorphenylcarbonyloxy, Cyclopropylcarbonyloxy, C₁-C₄-Sulfonyloxy, Phenylsulfonyloxy und 2-, 3- oder 4-Methylphenylsulfonyloxy;

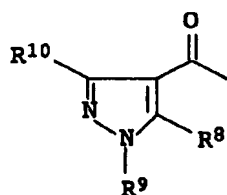
10

R⁹ für C₁-C₄-Alkyl oder Cyclopropyl und

R¹⁰ für Wasserstoff oder C₁-C₄-Alkyl stehen.

15 Ganz besonders bevorzugte Reste der allgemeinen Formel IIa sind die in Tabelle 1 angegebenen Reste IIa1 bis IIa90.

20



IIa

25

Tabelle 1

IIa	R ⁸	R ⁹	R ¹⁰
IIa1	OH	CH ₃	H
IIa2	OCH ₃	CH ₃	H
IIa3	OCH ₂ -C ₆ H ₅	CH ₃	H
30 IIa4	OC(O)CH ₃	CH ₃	H
IIa5	OC(O)C ₆ H ₅	CH ₃	H
IIa6	OC(O)-(3-C ₆ H ₄ F)	CH ₃	H
IIa7	OS(O) ₂ CH ₃	CH ₃	H
35 IIa8	OS(O) ₂ -(4-C ₆ H ₄ CH ₃)	CH ₃	H
IIa9	OH	C ₂ H ₅	H
IIa10	OCH ₃	C ₂ H ₅	H
IIa11	OCH ₂ -C ₆ H ₅	C ₂ H ₅	H
40 IIa12	OC(O)CH ₃	C ₂ H ₅	H
IIa13	OC(O)C ₆ H ₅	C ₂ H ₅	H
IIa14	OC(O)-(3-C ₆ H ₄ F)	C ₂ H ₅	H
IIa15	OS(O) ₂ CH ₃	C ₂ H ₅	H
IIa16	OS(O) ₂ -(4-C ₆ H ₄ CH ₃)	C ₂ H ₅	H
45 IIa17	OH	i-C ₃ H ₇	H
IIa18	OCH ₃	i-C ₃ H ₇	H

40

	IIa	R ⁸	R ⁹	R ¹⁰
5	IIa19	OCH ₂ -C ₆ H ₅	i-C ₃ H ₇	H
	IIa20	OC(O)CH ₃	i-C ₃ H ₇	H
	IIa21	OC(O)C ₆ H ₅	i-C ₃ H ₇	H
	IIa22	OC(O)-(3-C ₆ H ₄ F)	i-C ₃ H ₇	H
	IIa23	OS(O) ₂ CH ₃	i-C ₃ H ₇	H
10	IIa24	OS(O) ₂ -(4-C ₆ H ₄ CH ₃)	i-C ₃ H ₇	H
	IIa25	OH	t-C ₄ H ₉	H
	IIa26	OCH ₃	t-C ₄ H ₉	H
	IIa27	OCH ₂ -C ₆ H ₅	t-C ₄ H ₉	H
	IIa28	OC(O)CH ₃	t-C ₄ H ₉	H
15	IIa29	OC(O)C ₆ H ₅	t-C ₄ H ₉	H
	IIa30	OC(O)-(3-C ₆ H ₄ F)	t-C ₄ H ₉	H
	IIa31	OS(O) ₂ CH ₃	t-C ₄ H ₉	H
	IIa32	OS(O) ₂ -(4-C ₆ H ₄ CH ₃)	t-C ₄ H ₉	H
	IIa33	OH	CH ₃	CH ₃
20	IIa34	OCH ₃	CH ₃	CH ₃
	IIa35	OCH ₂ -C ₆ H ₅	CH ₃	CH ₃
	IIa36	OC(O)CH ₃	CH ₃	CH ₃
	IIa37	OC(O)C ₆ H ₅	CH ₃	CH ₃
	IIa38	OC(O)-(3-C ₆ H ₄ F)	CH ₃	CH ₃
25	IIa39	OS(O) ₂ CH ₃	CH ₃	CH ₃
	IIa40	OS(O) ₂ -(4-C ₆ H ₄ CH ₃)	CH ₃	CH ₃
	IIa41	OH	C ₂ H ₅	CH ₃
	IIa42	OCH ₃	C ₂ H ₅	CH ₃
	IIa43	OCH ₂ -C ₆ H ₅	C ₂ H ₅	CH ₃
30	IIa44	OC(O)CH ₃	C ₂ H ₅	CH ₃
	IIa45	OC(O)C ₆ H ₅	C ₂ H ₅	CH ₃
	IIa46	OC(O)-(3-C ₆ H ₄ F)	C ₂ H ₅	CH ₃
	IIa47	OS(O) ₂ CH ₃	C ₂ H ₅	CH ₃
	IIa48	OS(O) ₂ -(4-C ₆ H ₄ CH ₃)	C ₂ H ₅	CH ₃
35	IIa49	OH	i-C ₃ H ₇	CH ₃
	IIa50	OCH ₃	i-C ₃ H ₇	CH ₃
	IIa51	OCH ₂ -C ₆ H ₅	i-C ₃ H ₇	CH ₃
	IIa52	OC(O)CH ₃	i-C ₃ H ₇	CH ₃
	IIa53	OC(O)C ₆ H ₅	i-C ₃ H ₇	CH ₃
40	IIa54	OC(O)-(3-C ₆ H ₄ F)	i-C ₃ H ₇	CH ₃
	IIa55	OS(O) ₂ CH ₃	i-C ₃ H ₇	CH ₃
	IIa56	OS(O) ₂ -(4-C ₆ H ₄ CH ₃)	i-C ₃ H ₇	CH ₃
	IIa57	OH	t-C ₄ H ₉	CH ₃

	IIa	R ⁸	R ⁹	R ¹⁰
	IIa58	OCH ₃	t-C ₄ H ₉	CH ₃
	IIa59	OCH ₂ -C ₆ H ₅	t-C ₄ H ₉	CH ₃
5	IIa60	OC(O)CH ₃	t-C ₄ H ₉	CH ₃
	IIa61	OC(O)C ₆ H ₅	t-C ₄ H ₉	CH ₃
	IIa62	OC(O)-(3-C ₆ H ₄ F)	t-C ₄ H ₉	CH ₃
	IIa63	OS(O) ₂ CH ₃	t-C ₄ H ₉	CH ₃
10	IIa64	OS(O) ₂ -(4-C ₆ H ₄ CH ₃)	t-C ₄ H ₉	CH ₃
	IIa65	OH	c-C ₃ H ₅	CH ₃
	IIa66	OCH ₃	c-C ₃ H ₅	CH ₃
	IIa67	OCH ₂ -C ₆ H ₅	c-C ₃ H ₅	CH ₃
	IIa68	OC(O)CH ₃	c-C ₃ H ₅	CH ₃
15	IIa69	OC(O)C ₆ H ₅	c-C ₃ H ₅	CH ₃
	IIa70	OC(O)-(3-C ₆ H ₄ F)	c-C ₃ H ₅	CH ₃
	IIa71	OS(O) ₂ CH ₃	c-C ₃ H ₅	CH ₃
	IIa72	OS(O) ₂ -(4-C ₆ H ₄ CH ₃)	c-C ₃ H ₅	CH ₃
20	IIa73	OH	c-C ₃ H ₅	H
	IIa74	OCH ₃	c-C ₃ H ₅	H
	IIa75	OCH ₂ -C ₆ H ₅	c-C ₃ H ₅	H
	IIa76	OC(O)CH ₃	c-C ₃ H ₅	H
25	IIa77	OC(O)C ₆ H ₅	c-C ₃ H ₅	H
	IIa78	OC(O)-(3-C ₆ H ₄ F)	c-C ₃ H ₅	H
	IIa79	OS(O) ₂ CH ₃	c-C ₃ H ₅	H
	IIa80	OS(O) ₂ -(4-C ₆ H ₄ CH ₃)	c-C ₃ H ₅	H
30	IIa81	OC(O)c-C ₃ H ₅	CH ₃	H
	IIa82	OC(O)-c-C ₃ H ₅	C ₂ H ₅	H
	IIa83	OC(O)-c-C ₃ H ₅	i-C ₃ H ₇	H
	IIa84	OC(O)-c-C ₃ H ₅	t-C ₄ H ₉	H
	IIa85	OC(O)-c-C ₃ H ₅	c-C ₃ H ₅	H
35	IIa86	OC(O)-c-C ₃ H ₅	CH ₃	CH ₃
	IIa87	OC(O)-c-C ₃ H ₅	C ₂ H ₅	CH ₃
	IIa88	OC(O)-c-C ₃ H ₅	i-C ₃ H ₇	CH ₃
	IIa89	OC(O)-c-C ₃ H ₅	t-C ₄ H ₉	CH ₃
40	IIa90	OC(O)-c-C ₃ H ₅	c-C ₃ H ₅	CH ₃

i-C₃H₇: Isopropylc-C₃H₅: Cyclopropylt-C₄H₉: tertiär-Butyl45 C₆H₅: Phenyl3-C₆H₄F: 3-Fluorphenyl4-C₆H₄CH₃: 4-Methylphenyl

Tabelle A: Besonders bevorzugte Kombinationen von R¹, R² und R³

	R ³	R ¹	R ²
5	1 H	CH ₃	CH ₃
	2 F	CH ₃	CH ₃
	3 Cl	CH ₃	CH ₃
	4 Br	CH ₃	CH ₃
10	5 OH	CH ₃	CH ₃
	6 SH	CH ₃	CH ₃
	7 NH ₂	CH ₃	CH ₃
	8 CN	CH ₃	CH ₃
15	9 NO ₂	CH ₃	CH ₃
	10 SCN	CH ₃	CH ₃
	11 NH-NH ₂	CH ₃	CH ₃
	12 CH ₃	CH ₃	CH ₃
20	13 C ₂ H ₅	CH ₃	CH ₃
	14 n-C ₃ H ₇	CH ₃	CH ₃
	15 i-C ₃ H ₇	CH ₃	CH ₃
	16 n-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃
25	17 s-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃
	18 i-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃
	19 t-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃
	20 CH ₂ Cl	CH ₃	CH ₃
30	21 CHCl ₂	CH ₃	CH ₃
	22 CCl ₃	CH ₃	CH ₃
	23 CH ₂ F	CH ₃	CH ₃
	24 CHF ₂	CH ₃	CH ₃
35	25 CF ₃	CH ₃	CH ₃
	62 CH ₂ CF ₃	CH ₃	CH ₃
	27 CH ₂ OCH ₃	CH ₃	CH ₃
	28 CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₃	CH ₃
40	29 CH ₂ NH ₂	CH ₃	CH ₃
	30 OCH ₃	CH ₃	CH ₃
	31 OC ₂ H ₅	CH ₃	CH ₃
	32 O-n-C ₃ H ₇	CH ₃	CH ₃
45	33 O-i-C ₃ H ₇	CH ₃	CH ₃
	34 O-n-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃
	35 O-s-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃
	36 O-i-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃

43

	R ³	R ¹	R ²
	37	O-t-C ₄ H ₉	CH ₃
	38	OCHF ₂	CH ₃
5	39	OCF ₃	CH ₃
	40	OCH ₂ CF ₃	CH ₃
	41	OCH ₂ OCH ₃	CH ₃
	42	SCH ₃	CH ₃
10	43	SC ₂ H ₅	CH ₃
	44	S-n-C ₃ H ₇	CH ₃
	45	S-i-C ₃ H ₇	CH ₃
	46	S-n-C ₄ H ₉	CH ₃
	47	S-s-C ₄ H ₉	CH ₃
15	48	S-i-C ₄ H ₉	CH ₃
	49	S-t-C ₄ H ₉	CH ₃
	50	SCHF ₂	CH ₃
	51	SCF ₃	CH ₃
20	52	SCH ₂ CF ₃	CH ₃
	53	SCH ₂ OCH ₃	CH ₃
	54	NHCH ₃	CH ₃
	55	NHC ₂ H ₅	CH ₃
25	56	NH-Phenyl	CH ₃
	57	N(CH ₃) ₂	CH ₃
	58	N(CH ₂ CH ₃) ₂	CH ₃
	59	N(Phenyl) ₂	CH ₃
30	60	(CH ₂) ₂ COCH ₃	CH ₃
	61	Phenyl	CH ₃
	62	2-F-Phenyl	CH ₃
	63	3-F-Phenyl	CH ₃
	64	4-F-Phenyl	CH ₃
35	65	2-Cl-Phenyl	CH ₃
	66	3-Cl-Phenyl	CH ₃
	67	4-Cl-Phenyl	CH ₃
	68	2-OH-Phenyl	CH ₃
40	69	3-OH-Phenyl	CH ₃
	70	4-OH-Phenyl	CH ₃
	71	2-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃
	72	3-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃
	73	4-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃
45	74	2-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃
	75	3-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃

44

	R ³	R ¹	R ²
5	76	4-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃
	77	2-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃
	78	3- OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃
	79	4-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃
	80	2-CF ₃ -Phenyl	CH ₃
10	81	3-CF ₃ -Phenyl	CH ₃
	82	4-CF ₃ -Phenyl	CH ₃
	83	2-CH ₃ -Phenyl	CH ₃
	84	3-CH ₃ -Phenyl	CH ₃
	85	4-CH ₃ -Phenyl	CH ₃
15	86	2-NO ₂ -Phenyl	CH ₃
	87	3-NO ₂ -Phenyl	CH ₃
	88	4-NO ₂ -Phenyl	CH ₃
	89	2-Pyridyl	CH ₃
	90	3-Pyridyl	CH ₃
20	91	4-Pyridyl	CH ₃
	92	3'-CH ₃ -2-pyridyl	CH ₃
	93	4'-CH ₃ -2-pyridyl	CH ₃
	94	5'-CH ₃ -2-pyridyl	CH ₃
	95	6'-CH ₃ -2-pyridyl	CH ₃
25	96	2'-CH ₃ -3-pyridyl	CH ₃
	97	4'-CH ₃ -3-pyridyl	CH ₃
	98	5'-CH ₃ -3-pyridyl	CH ₃
	99	6'-CH ₃ -3-pyridyl	CH ₃
	100	2'-CH ₃ -4-pyridyl	CH ₃
30	101	3'-CH ₃ -4-pyridyl	CH ₃
	102	3'-Cl-2-pyridyl	CH ₃
	103	4'-Cl-2-pyridyl	CH ₃
	104	5'-Cl-2-pyridyl	CH ₃
	105	6'-Cl-2-pyridyl	CH ₃
35	106	2'-Cl-3-pyridyl	CH ₃
	107	4'-Cl-3-pyridyl	CH ₃
	108	5'-Cl-3-pyridyl	CH ₃
	109	6'-Cl-3-pyridyl	CH ₃
	110	2'-Cl-4-pyridyl	CH ₃
40	111	3'-Cl-4-pyridyl	CH ₃
	112	Cyclohexylamino	CH ₃
	113	Cyclopentylamino	CH ₃
	114	Morpholino	CH ₃
	45		

45

	R ³	R ¹	R ²
5	115	CO ₂ H	CH ₃
	116	CO ₂ CH ₃	CH ₃
	117	CO ₂ C ₂ H ₅	CH ₃
	118	CO ₂ -n-C ₃ H ₇	CH ₃
	119	CO ₂ -i-C ₃ H ₇	CH ₃
10	120	CO ₂ -n-C ₄ H ₉	CH ₃
	121	CO ₂ -s-C ₄ H ₉	CH ₃
	122	CO ₂ -i-C ₄ H ₉	CH ₃
	123	CO ₂ -t-C ₄ H ₉	CH ₃
	124	CO ₂ -Ph	CH ₃
15	125	CO ₂ -3-Pyridyl	CH ₃
	126	CONHCH ₃	CH ₃
	127	CONHC ₂ H ₅	CH ₃
	128	CONHPh	CH ₃
	129	CON(CH ₃) ₂	CH ₃
20	130	CON(CH ₂ CH ₃) ₂	CH ₃
	131	CON(Phenyl) ₂	CH ₃
	132	H	OCH ₃
	133	F	OCH ₃
	134	Cl	OCH ₃
25	135	Br	OCH ₃
	136	OH	OCH ₃
	137	SH	OCH ₃
	138	NH ₂	OCH ₃
	139	CN	OCH ₃
30	140	NO ₂	OCH ₃
	141	SCN	OCH ₃
	142	NH-NH ₂	OCH ₃
	143	CH ₃	OCH ₃
	144	C ₂ H ₅	OCH ₃
35	145	n-C ₃ H ₇	OCH ₃
	146	i-C ₃ H ₇	OCH ₃
	147	n-C ₄ H ₉	OCH ₃
	148	s-C ₄ H ₉	OCH ₃
	149	i-C ₄ H ₉	OCH ₃
40	150	t-C ₄ H ₉	OCH ₃
	151	CH ₂ Cl	OCH ₃
	152	CHCl ₂	OCH ₃
	153	CCl ₃	OCH ₃
			CH ₃

46

	R ³	R ¹	R ²
5	154 CH ₂ F	OCH ₃	CH ₃
	155 CHF ₂	OCH ₃	CH ₃
	156 CF ₃	OCH ₃	CH ₃
	157 CH ₂ CF ₃	OCH ₃	CH ₃
	158 CH ₂ OCH ₃	OCH ₃	CH ₃
10	159 CH ₂ OCH ₂ CH ₃	OCH ₃	CH ₃
	160 CH ₂ NH ₂	OCH ₃	CH ₃
	161 OCH ₃	OCH ₃	CH ₃
	162 OC ₂ H ₅	OCH ₃	CH ₃
	163 O-n-C ₃ H ₇	OCH ₃	CH ₃
15	164 O-i-C ₃ H ₇	OCH ₃	CH ₃
	165 O-n-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃
	166 O-s-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃
	167 O-i-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃
	168 O-t-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃
20	169 OCHF ₂	OCH ₃	CH ₃
	170 OCF ₃	OCH ₃	CH ₃
	171 OCH ₂ CF ₃	OCH ₃	CH ₃
	172 OCH ₂ OCH ₃	OCH ₃	CH ₃
	173 SCH ₃	OCH ₃	CH ₃
25	174 SC ₂ H ₅	OCH ₃	CH ₃
	175 S-n-C ₃ H ₇	OCH ₃	CH ₃
	176 S-i-C ₃ H ₇	OCH ₃	CH ₃
	177 S-n-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃
	178 S-s-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃
30	179 S-i-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃
	180 S-t-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃
	181 SCHF ₂	OCH ₃	CH ₃
	182 SCF ₃	OCH ₃	CH ₃
	183 SCH ₂ CF ₃	OCH ₃	CH ₃
35	184 SCH ₂ OCH ₃	OCH ₃	CH ₃
	185 NHCH ₃	OCH ₃	CH ₃
	186 NHC ₂ H ₅	OCH ₃	CH ₃
	187 NHPhenyl	OCH ₃	CH ₃
	188 N(CH ₃) ₂	OCH ₃	CH ₃
40	189 N(CH ₂ CH ₃) ₂	OCH ₃	CH ₃
	190 N(Phenyl) ₂	OCH ₃	CH ₃
	191 (CH ₂) ₂ COCH ₃	OCH ₃	CH ₃
	192 Phenyl	OCH ₃	CH ₃

47

	R ³	R ¹	R ²
5	193 2-F-Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	194 3-F-Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	195 4-F-Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	196 2-Cl-Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	197 3-Cl-Phenyl	OCH ₃	CH ₃
10	198 4-Cl-Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	199 2-OH-Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	200 3-OH-Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	201 4-OH-Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	202 2-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
15	203 3-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	204 4-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	205 2-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	206 3-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	207 4-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
20	208 2-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	209 3-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	210 4-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	211 2-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	212 3-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
25	213 4-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	214 2-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	215 3-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	216 4-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	217 2-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
30	218 3-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	219 4-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	220 2-Pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	221 3-Pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	222 4-Pyridyl	OCH ₃	CH ₃
35	223 3'-CH ₃ -2-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	224 4'-CH ₃ -2-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	225 5'-CH ₃ -2-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	226 6'-CH ₃ -2-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	227 2'-CH ₃ -3-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
40	228 4'-CH ₃ -3-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	229 5'-CH ₃ -3-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	230 6'-CH ₃ -3-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	231 2'-CH ₃ -4-pyridyl	OCH ₃	CH ₃

48

	R ³	R ¹	R ²	
5	232	3'-CH ₃ -4-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	233	3'-Cl-2-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	234	4'-Cl-2-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	235	5'-Cl-2-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	236	6'-Cl-2-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
10	237	2'-Cl-3-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	238	4'-Cl-3-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	239	5'-Cl-3-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	240	6'-Cl-3-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
15	241	2'-Cl-4-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	242	3'-Cl-4-pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	243	Cyclohexylamino	OCH ₃	CH ₃
	244	Cyclopentylamino	OCH ₃	CH ₃
	245	Morpholino	OCH ₃	CH ₃
20	246	CO ₂ H	OCH ₃	CH ₃
	247	CO ₂ CH ₃	OCH ₃	CH ₃
	248	CO ₂ C ₂ H ₅	OCH ₃	CH ₃
	249	CO ₂ -n-C ₃ H ₇	OCH ₃	CH ₃
	250	CO ₂ -i-C ₃ H ₇	OCH ₃	CH ₃
25	251	CO ₂ -n-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃
	252	CO ₂ -s-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃
	253	CO ₂ -i-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃
	254	CO ₂ -t-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃
	255	CO ₂ -Ph	OCH ₃	CH ₃
30	256	CO ₂ -3-Pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	257	CONHCH ₃	OCH ₃	CH ₃
	258	CONHC ₂ H ₅	OCH ₃	CH ₃
35	259	CONHPhenyl	OCH ₃	CH ₃
	260	CON(CH ₃) ₂	OCH ₃	CH ₃
	261	CON(CH ₂ CH ₃) ₂	OCH ₃	CH ₃
	262	CON(Phenyl) ₂	OCH ₃	CH ₃
40	263	H	Cl	CH ₃
	264	F	Cl	CH ₃
	265	Cl	Cl	CH ₃
	266	Br	Cl	CH ₃
	267	OH	Cl	CH ₃
45	268	SH	Cl	CH ₃
	269	NH ₂	Cl	CH ₃
	270	CN	Cl	CH ₃

49

	R ³	R ¹	R ²	
5	271	NO ₂	Cl	CH ₃
	272	SCN	Cl	CH ₃
	273	NH-NH ₂	Cl	CH ₃
	274	CH ₃	Cl	CH ₃
	275	C ₂ H ₅	Cl	CH ₃
10	276	n-C ₃ H ₇	Cl	CH ₃
	277	i-C ₃ H ₇	Cl	CH ₃
	278	n-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃
	279	s-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃
	280	i-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃
15	281	t-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃
	282	CH ₂ Cl	Cl	CH ₃
	283	CHCl ₂	Cl	CH ₃
	284	CCl ₃	Cl	CH ₃
	285	CH ₂ F	Cl	CH ₃
20	286	CHF ₂	Cl	CH ₃
	287	CF ₃	Cl	CH ₃
	288	CH ₂ CF ₃	Cl	CH ₃
	289	CH ₂ OCH ₃	Cl	CH ₃
	290	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	Cl	CH ₃
25	291	CH ₂ NH ₂	Cl	CH ₃
	292	OCH ₃	Cl	CH ₃
	293	OC ₂ H ₅	Cl	CH ₃
	294	O-n-C ₃ H ₇	Cl	CH ₃
	295	O-i-C ₃ H ₇	Cl	CH ₃
30	296	O-n-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃
	297	O-s-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃
	298	O-i-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃
	299	O-t-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃
	300	OCHF ₂	Cl	CH ₃
35	301	OCF ₃	Cl	CH ₃
	302	OCH ₂ CF ₃	Cl	CH ₃
	303	OCH ₂ OCH ₃	Cl	CH ₃
	304	SCH ₃	Cl	CH ₃
	305	SC ₂ H ₅	Cl	CH ₃
40	306	S-n-C ₃ H ₇	Cl	CH ₃
	307	S-i-C ₃ H ₇	Cl	CH ₃
	308	S-n-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃
	309	S-s-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃

50

	R ³	R ¹	R ²
5	310 S-i-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃
	311 S-t-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃
	312 SCHF ₂	Cl	CH ₃
	313 SCF ₃	Cl	CH ₃
	314 SCH ₂ CF ₃	Cl	CH ₃
10	315 SCH ₂ OCH ₃	Cl	CH ₃
	316 NHCH ₃	Cl	CH ₃
	317 NHC ₂ H ₅	Cl	CH ₃
	318 NH-Phenyl	Cl	CH ₃
	319 N(CH ₃) ₂	Cl	CH ₃
15	320 N(CH ₂ CH ₃) ₂	Cl	CH ₃
	321 N(Phenyl) ₂	Cl	CH ₃
	322 (CH ₂) ₂ COCH ₃	Cl	CH ₃
	323 Phenyl	Cl	CH ₃
	324 2-F-Phenyl	Cl	CH ₃
20	325 3-F-Phenyl	Cl	CH ₃
	362 4-F-Phenyl	Cl	CH ₃
	327 2-Cl-Phenyl	Cl	CH ₃
	328 3-Cl-Phenyl	Cl	CH ₃
	329 4-Cl-Phenyl	Cl	CH ₃
25	330 2-OH-Phenyl	Cl	CH ₃
	331 3-OH-Phenyl	Cl	CH ₃
	332 4-OH-Phenyl	Cl	CH ₃
	333 2-OCH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃
	334 3-OCH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃
30	335 4-OCH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃
	336 2-OCF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃
	337 3-OCF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃
	338 4-OCF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃
	339 2-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃
35	340 3-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃
	341 4-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃
	342 2-CF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃
	343 3-CF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃
	344 4-CF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃
40	345 2-CH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃
	346 3-CH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃
	347 4-CH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃
	348 2-NO ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃

51

	R ³	R ¹	R ²	
5	349	3-NO ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃
	350	4-NO ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃
	351	2-Pyridyl	Cl	CH ₃
	352	3-Pyridyl	Cl	CH ₃
	353	4-Pyridyl	Cl	CH ₃
10	354	3'-CH ₃ -2-pyridyl	Cl	CH ₃
	355	4'-CH ₃ -2-pyridyl	Cl	CH ₃
	356	5'-CH ₃ -2-pyridyl	Cl	CH ₃
	357	6'-CH ₃ -2-pyridyl	Cl	CH ₃
	358	2'-CH ₃ -3-pyridyl	Cl	CH ₃
15	359	4'-CH ₃ -3-pyridyl	Cl	CH ₃
	360	5'-CH ₃ -3-pyridyl	Cl	CH ₃
	361	6'-CH ₃ -3-pyridyl	Cl	CH ₃
	362	2'-CH ₃ -4-pyridyl	Cl	CH ₃
	363	3'-CH ₃ -4-pyridyl	Cl	CH ₃
20	364	3'-Cl-2-pyridyl	Cl	CH ₃
	365	4'-Cl-2-pyridyl	Cl	CH ₃
	366	5'-Cl-2-pyridyl	Cl	CH ₃
	367	6'-Cl-2-pyridyl	Cl	CH ₃
	368	2'-Cl-3-pyridyl	Cl	CH ₃
25	369	4'-Cl-3-pyridyl	Cl	CH ₃
	370	5'-Cl-3-pyridyl	Cl	CH ₃
	371	6'-Cl-3-pyridyl	Cl	CH ₃
	372	2'-Cl-4-pyridyl	Cl	CH ₃
	373	3'-Cl-4-pyridyl	Cl	CH ₃
30	374	Cyclohexylamino	Cl	CH ₃
	375	Cyclopentylamino	Cl	CH ₃
	376	Morpholino	Cl	CH ₃
	377	CO ₂ H	Cl	CH ₃
	378	CO ₂ CH ₃	Cl	CH ₃
35	379	CO ₂ C ₂ H ₅	Cl	CH ₃
	380	CO ₂ -n-C ₃ H ₇	Cl	CH ₃
	381	CO ₂ -i-C ₃ H ₇	Cl	CH ₃
	382	CO ₂ -n-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃
	383	CO ₂ -s-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃
40	384	CO ₂ -i-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃
	385	CO ₂ -t-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃
	386	CO ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃
	387	CO ₂ -3-Pyridyl	Cl	CH ₃
	45			

52

	R ³	R ¹	R ²
5	388	CONHCH ₃	Cl
	389	CONHC ₂ H ₅	Cl
	390	CONH-Phenyl	Cl
	391	CON(CH ₃) ₂	Cl
	392	CON(CH ₂ CH ₃) ₂	Cl
10	393	CON(Phenyl) ₂	Cl
	394	H	CH ₃
	394	F	CH ₃
	396	Cl	CH ₃
	397	Br	CH ₃
15	398	OH	CH ₃
	399	SH	CH ₃
	400	NH ₂	CH ₃
	401	CN	CH ₃
	402	NO ₂	CH ₃
20	403	SCN	CH ₃
	404	NH-NH ₂	CH ₃
	405	CH ₃	CH ₃
	406	C ₂ H ₅	CH ₃
	407	n-C ₃ H ₇	CH ₃
25	408	i-C ₃ H ₇	CH ₃
	409	n-C ₄ H ₉	CH ₃
	410	s-C ₄ H ₉	CH ₃
	411	i-C ₄ H ₉	CH ₃
	412	t-C ₄ H ₉	CH ₃
30	413	CH ₂ Cl	CH ₃
	414	CHCl ₂	CH ₃
	415	CCl ₃	CH ₃
	416	CH ₂ F	CH ₃
	417	CHF ₂	CH ₃
35	418	CF ₃	CH ₃
	419	CH ₂ CF ₃	CH ₃
	420	CH ₂ OCH ₃	CH ₃
	421	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₃
	422	CH ₂ NH ₂	CH ₃
40	423	OCH ₃	CH ₃
	424	OC ₂ H ₅	CH ₃
	425	O-n-C ₃ H ₇	CH ₃
	462	O-i-C ₃ H ₇	CH ₃
	462	O-i-C ₃ H ₇	CH ₃

53

	R ³	R ¹	R ²	
5	427	O-n-C ₄ H ₉	CH ₃	H
	428	O-s-C ₄ H ₉	CH ₃	H
	429	O-i-C ₄ H ₉	CH ₃	H
	430	O-t-C ₄ H ₉	CH ₃	H
	431	OCHF ₂	CH ₃	H
10	432	OCF ₃	CH ₃	H
	433	OCH ₂ CF ₃	CH ₃	H
	434	OCH ₂ OCH ₃	CH ₃	H
	435	SCH ₃	CH ₃	H
	436	SC ₂ H ₅	CH ₃	H
15	437	S-n-C ₃ H ₇	CH ₃	H
	438	S-i-C ₃ H ₇	CH ₃	H
	439	S-n-C ₄ H ₉	CH ₃	H
	440	S-s-C ₄ H ₉	CH ₃	H
	441	S-i-C ₄ H ₉	CH ₃	H
20	442	S-t-C ₄ H ₉	CH ₃	H
	443	SCHF ₂	CH ₃	H
	444	SCF ₃	CH ₃	H
	445	SCH ₂ CF ₃	CH ₃	H
	446	SCH ₂ OCH ₃	CH ₃	H
25	447	NHCH ₃	CH ₃	H
	448	NHC ₂ H ₅	CH ₃	H
	449	NH-Phenyl	CH ₃	H
	450	N(CH ₃) ₂	CH ₃	H
	451	N(CH ₂ CH ₃) ₂	CH ₃	H
30	452	N(Phenyl) ₂	CH ₃	H
	453	(CH ₂) ₂ COCH ₃	CH ₃	H
	454	Phenyl	CH ₃	H
	455	2-F-Phenyl	CH ₃	H
	456	3-F-Phenyl	CH ₃	H
35	457	4-F-Phenyl	CH ₃	H
	458	2-Cl-Phenyl	CH ₃	H
	459	3-Cl-Phenyl	CH ₃	H
	460	4-Cl-Phenyl	CH ₃	H
	461	2-OH-Phenyl	CH ₃	H
40	462	3-OH-Phenyl	CH ₃	H
	463	4-OH-Phenyl	CH ₃	H
	464	2-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	H
	465	3-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	H

54

	R ³	R ¹	R ²
5	466	4-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃
	467	2-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃
	468	3-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃
	469	4-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃
	470	2-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃
10	471	3- OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃
	472	4-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃
	473	2-CF ₃ -Phenyl	CH ₃
	474	3-CF ₃ -Phenyl	CH ₃
	475	4-CF ₃ -Phenyl	CH ₃
15	476	2-CH ₃ -Phenyl	CH ₃
	477	3-CH ₃ -Phenyl	CH ₃
	478	4-CH ₃ -Phenyl	CH ₃
	479	2-NO ₂ -Phenyl	CH ₃
	480	3-NO ₂ -Phenyl	CH ₃
20	481	4-NO ₂ -Phenyl	CH ₃
	482	2-Pyridyl	CH ₃
	483	3-Pyridyl	CH ₃
	484	4-Pyridyl	CH ₃
	485	3'-CH ₃ -2-pyridyl	CH ₃
25	486	4'-CH ₃ -2-pyridyl	CH ₃
	487	5'-CH ₃ -2-pyridyl	CH ₃
	488	6'-CH ₃ -2-pyridyl	CH ₃
	489	2'-CH ₃ -3-pyridyl	CH ₃
	490	4'-CH ₃ -3-pyridyl	CH ₃
30	491	5'-CH ₃ -3-pyridyl	CH ₃
	492	6'-CH ₃ -3-pyridyl	CH ₃
	493	2'-CH ₃ -4-pyridyl	CH ₃
	494	3'-CH ₃ -4-pyridyl	CH ₃
	495	3'-Cl-2-pyridyl	CH ₃
35	496	4'-Cl-2-pyridyl	CH ₃
	497	5'-Cl-2-pyridyl	CH ₃
	498	6'-Cl-2-pyridyl	CH ₃
	499	2'-Cl-3-pyridyl	CH ₃
	500	4'-Cl-3-pyridyl	CH ₃
40	501	5'-Cl-3-pyridyl	CH ₃
	502	6'-Cl-3-pyridyl	CH ₃
	503	2'-Cl-4-pyridyl	CH ₃
	504	3'-Cl-4-pyridyl	CH ₃
	45		

55

	R ³	R ¹	R ²
5	505 Cyclohexylamino	CH ₃	H
	506 Cyclopentylamino	CH ₃	H
	507 Morpholino	CH ₃	H
	508 CO ₂ H	CH ₃	H
	509 CO ₂ CH ₃	CH ₃	H
10	510 CO ₂ C ₂ H ₅	CH ₃	H
	511 CO ₂ -n-C ₃ H ₇	CH ₃	H
	512 CO ₂ -i-C ₃ H ₇	CH ₃	H
	513 CO ₂ -n-C ₄ H ₉	CH ₃	H
	514 CO ₂ -s-C ₄ H ₉	CH ₃	H
15	515 CO ₂ -i-C ₄ H ₉	CH ₃	H
	516 CO ₂ -t-C ₄ H ₉	CH ₃	H
	517 CO ₂ -Ph	CH ₃	H
	518 CO ₂ -3-Pyridyl	CH ₃	H
	519 CONHCH ₃	CH ₃	H
20	520 CONHC ₂ H ₅	CH ₃	H
	521 CONH-Phenyl	CH ₃	H
	522 CON(CH ₃) ₂	CH ₃	H
	523 CON(CH ₂ CH ₃) ₂	CH ₃	H
	524 CON(Phenyl) ₂	CH ₃	H
25	525 H	OCH ₃	H
	526 F	OCH ₃	H
	527 Cl	OCH ₃	H
	528 Br	OCH ₃	H
	529 OH	OCH ₃	H
30	530 SH	OCH ₃	H
	531 NH ₂	OCH ₃	H
	532 CN	OCH ₃	H
	533 NO ₂	OCH ₃	H
	534 SCN	OCH ₃	H
35	535 NH-NH ₂	OCH ₃	H
	536 CH ₃	OCH ₃	H
	537 C ₂ H ₅	OCH ₃	H
	538 n-C ₃ H ₇	OCH ₃	H
	539 i-C ₃ H ₇	OCH ₃	H
40	540 n-C ₄ H ₉	OCH ₃	H
	541 s-C ₄ H ₉	OCH ₃	H
	542 i-C ₄ H ₉	OCH ₃	H
	543 t-C ₄ H ₉	OCH ₃	H

56

	R ³	R ¹	R ²
5	544	CH ₂ Cl	OCH ₃
	545	CHCl ₂	OCH ₃
	546	CCl ₃	OCH ₃
	547	CH ₂ F	OCH ₃
	548	CHF ₂	OCH ₃
10	549	CF ₃	OCH ₃
	550	CH ₂ CF ₃	OCH ₃
	551	CH ₂ OCH ₃	OCH ₃
	552	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	OCH ₃
	553	CH ₂ NH ₂	OCH ₃
15	554	OCH ₃	OCH ₃
	555	OC ₂ H ₅	OCH ₃
	556	O-n-C ₃ H ₇	OCH ₃
	557	O-i-C ₃ H ₇	OCH ₃
	558	O-n-C ₄ H ₉	OCH ₃
20	559	O-s-C ₄ H ₉	OCH ₃
	560	O-i-C ₄ H ₉	OCH ₃
	561	O-t-C ₄ H ₉	OCH ₃
	562	OCHF ₂	OCH ₃
	563	OCF ₃	OCH ₃
25	564	OCH ₂ CF ₃	OCH ₃
	565	OCH ₂ OCH ₃	OCH ₃
	566	SCH ₃	OCH ₃
	567	SC ₂ H ₅	OCH ₃
	568	S-n-C ₃ H ₇	OCH ₃
30	569	S-i-C ₃ H ₇	OCH ₃
	570	S-n-C ₄ H ₉	OCH ₃
	571	S-s-C ₄ H ₉	OCH ₃
	572	S-i-C ₄ H ₉	OCH ₃
	573	S-t-C ₄ H ₉	OCH ₃
35	574	SCHF ₂	OCH ₃
	575	SCF ₃	OCH ₃
	576	SCH ₂ CF ₃	OCH ₃
	577	SCH ₂ OCH ₃	OCH ₃
	578	NHCH ₃	OCH ₃
40	579	NHC ₂ H ₅	OCH ₃
	580	NHPh	OCH ₃
	581	N(CH ₃) ₂	OCH ₃
	582	N(CH ₂ CH ₃) ₂	OCH ₃
			H

57

	R ³	R ¹	R ²
5	583 N(Phenyl) ₂	OCH ₃	H
	584 (CH ₂) ₂ COCH ₃	OCH ₃	H
	585 Phenyl	OCH ₃	H
	586 2-F-Phenyl	OCH ₃	H
	587 3-F-Phenyl	OCH ₃	H
10	588 4-F-Phenyl	OCH ₃	H
	589 2-Cl-Phenyl	OCH ₃	H
	590 3-Cl-Phenyl	OCH ₃	H
	591 4-Cl-Phenyl	OCH ₃	H
	592 2-OH-Phenyl	OCH ₃	H
15	593 3-OH-Phenyl	OCH ₃	H
	594 4-OH-Phenyl	OCH ₃	H
	595 2-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	596 3-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	597 4-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
20	598 2-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	599 3-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	600 4-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	601 2-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	H
	602 3-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	H
25	603 4-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	H
	604 2-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	605 3-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	606 4-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	607 2-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
30	608 3-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	609 4-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	610 2-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	H
	611 3-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	H
	612 4-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	H
35	613 2-Pyridyl	OCH ₃	H
	614 3-Pyridyl	OCH ₃	H
	615 4-Pyridyl	OCH ₃	H
	616 3'-CH ₃ -2-pyridyl	OCH ₃	H
	617 4'-CH ₃ -2-pyridyl	OCH ₃	H
40	618 5'-CH ₃ -2-pyridyl	OCH ₃	H
	619 6'-CH ₃ -2-pyridyl	OCH ₃	H
	620 2'-CH ₃ -3-pyridyl	OCH ₃	H
	621 4'-CH ₃ -3-pyridyl	OCH ₃	H
	621 4'-CH ₃ -3-pyridyl	OCH ₃	H

58

	R ³	R ¹	R ²
5	622 5'-CH ₃ -3-pyridyl	OCH ₃	H
	623 6'-CH ₃ -3-pyridyl	OCH ₃	H
	624 2'-CH ₃ -4-pyridyl	OCH ₃	H
	625 3'-CH ₃ -4-pyridyl	OCH ₃	H
	626 3'-Cl-2-pyridyl	OCH ₃	H
10	627 4'-Cl-2-pyridyl	OCH ₃	H
	628 5'-Cl-2-pyridyl	OCH ₃	H
	629 6'-Cl-2-pyridyl	OCH ₃	H
	630 2'-Cl-3-pyridyl	OCH ₃	H
	631 4'-Cl-3-pyridyl	OCH ₃	H
15	632 5'-Cl-3-pyridyl	OCH ₃	H
	633 6'-Cl-3-pyridyl	OCH ₃	H
	634 2'-Cl-4-pyridyl	OCH ₃	H
	635 3'-Cl-4-pyridyl	OCH ₃	H
	636 Cyclohexylamino	OCH ₃	H
20	637 Cyclopentylamino	OCH ₃	H
	638 Morpholino	OCH ₃	H
	639 CO ₂ H	OCH ₃	H
	640 CO ₂ CH ₃	OCH ₃	H
	641 CO ₂ C ₂ H ₅	OCH ₃	H
25	642 CO ₂ -n-C ₃ H ₇	OCH ₃	H
	643 CO ₂ -i-C ₃ H ₇	OCH ₃	H
	644 CO ₂ -n-C ₄ H ₉	OCH ₃	H
	645 CO ₂ -s-C ₄ H ₉	OCH ₃	H
	646 CO ₂ -i-C ₄ H ₉	OCH ₃	H
30	647 CO ₂ -t-C ₄ H ₉	OCH ₃	H
	648 CO ₂ -Ph	OCH ₃	H
	649 CO ₂ -3-Pyridyl	OCH ₃	H
	650 CONHCH ₃	OCH ₃	H
	651 CONHC ₂ H ₅	OCH ₃	H
35	652 CONH-Phenyl	OCH ₃	H
	653 CON(CH ₃) ₂	OCH ₃	H
	654 CON(CH ₂ CH ₃) ₂	OCH ₃	H
	655 CON(Phenyl) ₂	OCH ₃	H
	656 H	Cl	H
40	657 F	Cl	H
	658 Cl	Cl	H
	659 Br	Cl	H
	660 OH	Cl	H

59

	R ³	R ¹	R ²
5	661 SH	Cl	H
	662 NH ₂	Cl	H
	663 CN	Cl	H
	664 NO ₂	Cl	H
	665 SCN	Cl	H
10	666 NH-NH ₂	Cl	H
	667 CH ₃	Cl	H
	668 C ₂ H ₅	Cl	H
	669 n-C ₃ H ₇	Cl	H
	670 i-C ₃ H ₇	Cl	H
15	671 n-C ₄ H ₉	Cl	H
	672 s-C ₄ H ₉	Cl	H
	673 i-C ₄ H ₉	Cl	H
	674 t-C ₄ H ₉	Cl	H
	675 CH ₂ Cl	Cl	H
20	676 CHCl ₂	Cl	H
	677 CCl ₃	Cl	H
	678 CH ₂ F	Cl	H
	679 CHF ₂	Cl	H
	680 CF ₃	Cl	H
25	681 CH ₂ CF ₃	Cl	H
	682 CH ₂ OCH ₃	Cl	H
	683 CH ₂ OCH ₂ CH ₃	Cl	H
	684 CH ₂ NH ₂	Cl	H
	685 OCH ₃	Cl	H
30	686 OC ₂ H ₅	Cl	H
	687 O-n-C ₃ H ₇	Cl	H
	688 O-i-C ₃ H ₇	Cl	H
	689 O-n-C ₄ H ₉	Cl	H
	690 O-s-C ₄ H ₉	Cl	H
35	691 O-i-C ₄ H ₉	Cl	H
	692 O-t-C ₄ H ₉	Cl	H
	693 OCHF ₂	Cl	H
	694 OCF ₃	Cl	H
	695 OCH ₂ CF ₃	Cl	H
40	696 OCH ₂ OCH ₃	Cl	H
	697 SCH ₃	Cl	H
	698 SC ₂ H ₅	Cl	H
	699 S-n-C ₃ H ₇	Cl	H

60

	R ³	R ¹	R ²
5	700 S-i-C ₃ H ₇	Cl	H
	701 S-n-C ₄ H ₉	Cl	H
	702 S-s-C ₄ H ₉	Cl	H
	703 S-i-C ₄ H ₉	Cl	H
	704 S-t-C ₄ H ₉	Cl	H
10	705 SCHF ₂	Cl	H
	706 SCF ₃	Cl	H
	707 SCH ₂ CF ₃	Cl	H
	708 SCH ₂ OCH ₃	Cl	H
	709 NHCH ₃	Cl	H
15	710 NHC ₂ H ₅	Cl	H
	711 NHPh	Cl	H
	712 N(CH ₃) ₂	Cl	H
	713 N(CH ₂ CH ₃) ₂	Cl	H
	714 N(Phenyl) ₂	Cl	H
20	715 (CH ₂) ₂ COCH ₃	Cl	H
	716 Phenyl	Cl	H
	717 2-F-Phenyl	Cl	H
	718 3-F-Phenyl	Cl	H
	719 4-F-Phenyl	Cl	H
25	720 2-Cl-Phenyl	Cl	H
	721 3-Cl-Phenyl	Cl	H
	722 4-Cl-Phenyl	Cl	H
	723 2-OH-Phenyl	Cl	H
	724 3-OH-Phenyl	Cl	H
30	725 4-OH-Phenyl	Cl	H
	726 2-OCH ₃ -Phenyl	Cl	H
	727 3-OCH ₃ -Phenyl	Cl	H
	728 4-OCH ₃ -Phenyl	Cl	H
	729 2-OCF ₃ -Phenyl	Cl	H
35	730 3-OCF ₃ -Phenyl	Cl	H
	731 4-OCF ₃ -Phenyl	Cl	H
	732 2-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	H
	733 3-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	H
	734 4-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	H
40	735 2-CF ₃ -Phenyl	Cl	H
	736 3-CF ₃ -Phenyl	Cl	H
	737 4-CF ₃ -Phenyl	Cl	H
	738 2-CH ₃ -Phenyl	Cl	H

61

	R ³	R ¹	R ²	
5	739	3-CH ₃ -Phenyl	Cl	H
	740	4-CH ₃ -Phenyl	Cl	H
	741	2-NO ₂ -Phenyl	Cl	H
	742	3-NO ₂ -Phenyl	Cl	H
	743	4-NO ₂ -Phenyl	Cl	H
10	744	2-Pyridyl	Cl	H
	745	3-Pyridyl	Cl	H
	746	4-Pyridyl	Cl	H
	747	3'-CH ₃ -2-pyridyl	Cl	H
	748	4'-CH ₃ -2-pyridyl	Cl	H
15	749	5'-CH ₃ -2-pyridyl	Cl	H
	750	6'-CH ₃ -2-pyridyl	Cl	H
	751	2'-CH ₃ -3-pyridyl	Cl	H
	752	4'-CH ₃ -3-pyridyl	Cl	H
	753	5'-CH ₃ -3-pyridyl	Cl	H
20	754	6'-CH ₃ -3-pyridyl	Cl	H
	755	2'-CH ₃ -4-pyridyl	Cl	H
	756	3'-CH ₃ -4-pyridyl	Cl	H
	757	3'-Cl-2-pyridyl	Cl	H
	758	4'-Cl-2-pyridyl	Cl	H
25	759	5'-Cl-2-pyridyl	Cl	H
	760	6'-Cl-2-pyridyl	Cl	H
	761	2'-Cl-3-pyridyl	Cl	H
	762	4'-Cl-3-pyridyl	Cl	H
	763	5'-Cl-3-pyridyl	Cl	H
30	764	6'-Cl-3-pyridyl	Cl	H
	765	2'-Cl-4-pyridyl	Cl	H
	766	3'-Cl-4-pyridyl	Cl	H
	767	Cyclohexylamino	Cl	H
	768	Cyclopentylamino	Cl	H
35	769	Morpholino	Cl	H
	770	CO ₂ H	Cl	H
	771	CO ₂ CH ₃	Cl	H
	772	CO ₂ C ₂ H ₅	Cl	H
	773	CO ₂ -n-C ₃ H ₇	Cl	H
40	774	CO ₂ -i-C ₃ H ₇	Cl	H
	775	CO ₂ -n-C ₄ H ₉	Cl	H
	776	CO ₂ -s-C ₄ H ₉	Cl	H
	777	CO ₂ -i-C ₄ H ₉	Cl	H
	45			

62

	R ³	R ¹	R ²	
	778	CO ₂ -t-C ₄ H ₉	Cl	H
	779	CO ₂ -Phenyl	Cl	H
5	780	CO ₂ -3-Pyridyl	Cl	H
	781	CONHCH ₃	Cl	H
	782	CONHC ₂ H ₅	Cl	H
	783	CONH-Phenyl	Cl	H
	784	CON(CH ₃) ₂	Cl	H
10	785	CON(CH ₂ CH ₃) ₂	Cl	H
	786	CON(Phenyl) ₂	Cl	H
	787	2-Fluorphenoxy	CH ₃	CH ₃
	788	2-Fluorphenoxy	OCH ₃	CH ₃
15	789	2-Fluorphenoxy	Cl	CH ₃
	790	2-Fluorphenoxy	CH ₃	H
	791	2-Fluorphenoxy	OCH ₃	H
	792	2-Fluorphenoxy	Cl	H
20	793	Phenoxy	CH ₃	CH ₃
	794	Phenoxy	OCH ₃	CH ₃
	795	Phenoxy	Cl	CH ₃
	796	Phenoxy	CH ₃	H
	797	Phenoxy	OCH ₃	H
25	798	Phenoxy	Cl	H
	799	2-Methoxyphenoxy	CH ₃	CH ₃
	800	2-Methoxyphenoxy	OCH ₃	CH ₃
	801	2-Methoxyphenoxy	Cl	CH ₃
30	802	2-Methoxyphenoxy	CH ₃	H
	803	2-Methoxyphenoxy	OCH ₃	H
	804	2-Methoxyphenoxy	Cl	H
	805	Cyclopropyl	CH ₃	CH ₃
35	806	Cyclopropyl	OCH ₃	CH ₃
	807	Cyclopropyl	Cl	CH ₃
	808	Cyclopropyl	CH ₃	H
	809	Cyclopropyl	OCH ₃	H
40	810	Cyclopropyl	Cl	H

Hier und im folgenden bedeuten beispielsweise:

- 2-F-Phenyl = 2-Fluorphenyl
 2-Cl-Phenyl = 2-Chlorphenyl
 2-OH-Phenyl = 2-Hydroxyphenyl
 2-OCH₃-Phenyl = 2-Methoxyphenyl

63

2-OCF₃-Phenyl = 2-Trifluormethoxyphenyl

2-OCHF₂-Phenyl = 2-Difluormethoxyphenyl

2-NO₂-Phenyl = 2-Nitrophenyl

3'-CH₃-2-pyridyl = 3'-Methylpyridin-2-yl

5

10

15

20

25

30

35

40

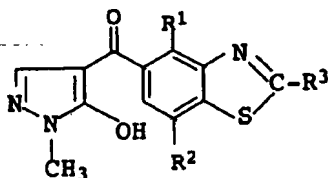
45

64

Beispiele für erfindungsgemäße besonders bevorzugte Benzothiazol-5-ylcarbonyl-Derivate von Pyrazolen (Verbindungen I-1 = Verbindungen I mit $X = C-R^3$ und $Y = S$) sind die in den Tabellen 2 bis 5 21 genannten Verbindungen.

- Tabelle 2: Verbindungen I-1a.1 bis I-1a.810

10



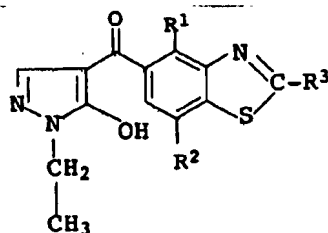
15

I-1a

Verbindungen der allgemeinen Formel I-1a, in der die Substituenten R_1 , R_2 und R_3 für jede einzelne Verbindung jeweils einer 20 Zeile der Tabelle A entsprechen.

- Tabelle 3: Verbindungen I-1b.1 bis I-1b.810

25



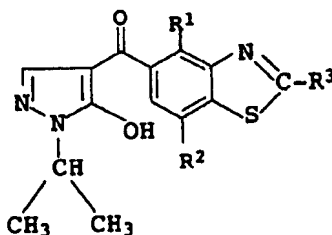
30

I-1b

Verbindungen der allgemeinen Formel I-1b, in der die Substituenten R_1 , R_2 und R_3 für jede einzelne Verbindung jeweils einer 35 Zeile der Tabelle A entsprechen.

- Tabelle 4: Verbindungen I-1c.1 bis I-1c.810

40



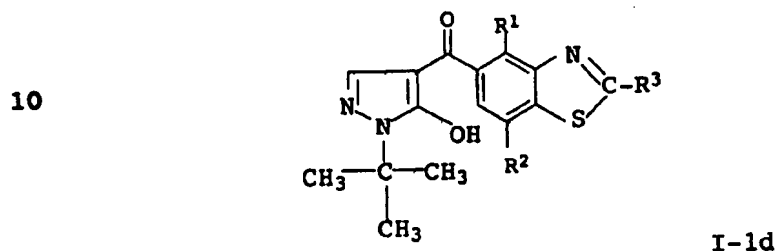
45

I-1c

65

Verbindungen der allgemeinen Formel I-1c, in der die Substituenten R¹, R² und R³ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

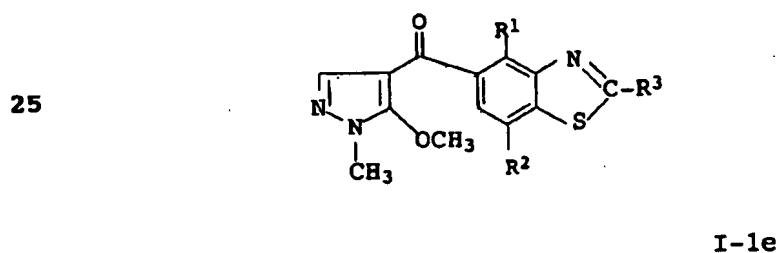
5 - Tabelle 5: Verbindungen I-1d.1 bis I-1d.810



15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-1b, in der die Substituenten R¹, R² und R³ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

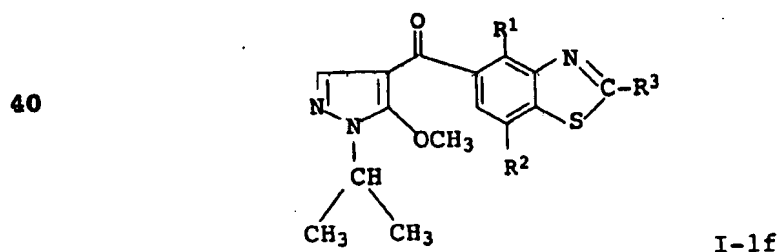
20 - Tabelle 6: Verbindungen I-1e.1 bis I-1e.810



30

Verbindungen der allgemeinen Formel I-1e, in der die Substituenten R¹, R² und R³ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

35 - Tabelle 7: Verbindungen I-1f.1 bis I-1f.810



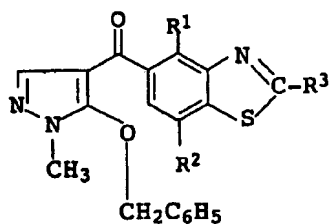
45

66

Verbindungen der allgemeinen Formel I-1f, in der die Substituenten R1, R2 und R3 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

5 - Tabelle 8: Verbindungen I-1g.1 bis I-1g.810

10



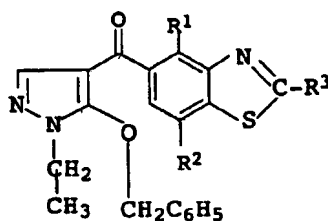
I-1g

15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-1g, in der die Substituenten R1, R2 und R3 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

20 - Tabelle 9: Verbindungen I-1h.1 bis I-1h.810

25



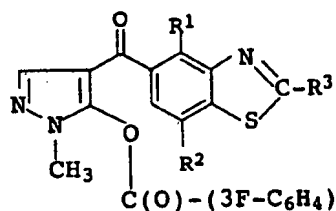
I-1h

30

Verbindungen der allgemeinen Formel I-1h, in der die Substituenten R1, R2 und R3 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

35 - Tabelle 10: Verbindungen I-1i.1 bis I-1i.810

40



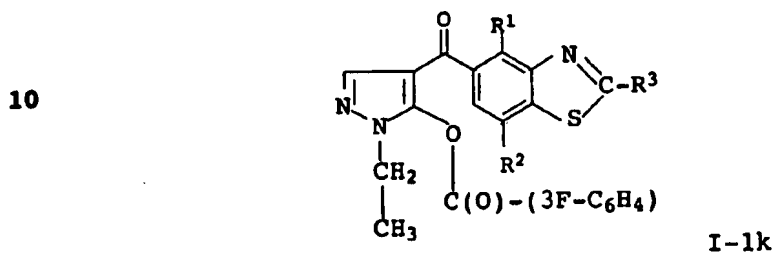
I-1i

45

67

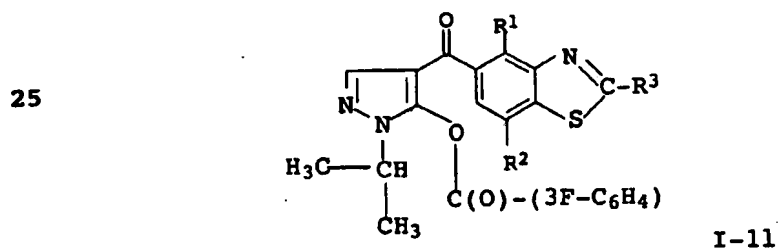
Verbindungen der allgemeinen Formel I-1i, in der die Substituenten R₁, R₂ und R₃ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

5 - Tabelle 11: Verbindungen I-1k.1 bis I-1k.810



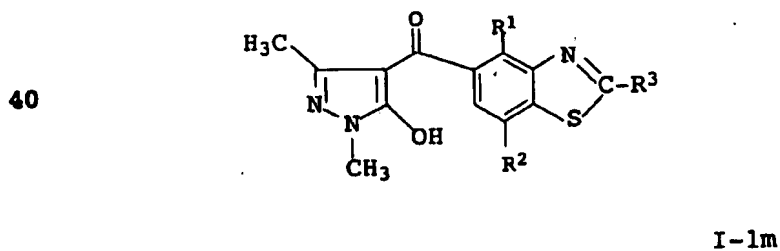
15 Verbindungen der allgemeinen Formel I-1k, in der die Substituenten R₁, R₂ und R₃ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

20 - Tabelle 12: Verbindungen I-1l.1 bis I-1l.810



30 Verbindungen der allgemeinen Formel I-1l, in der die Substituenten R₁, R₂ und R₃ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

35 - Tabelle 13: Verbindungen I-1m.1 bis I-1m.810

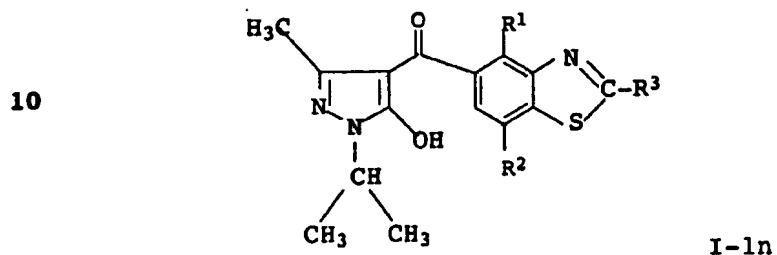


45

68

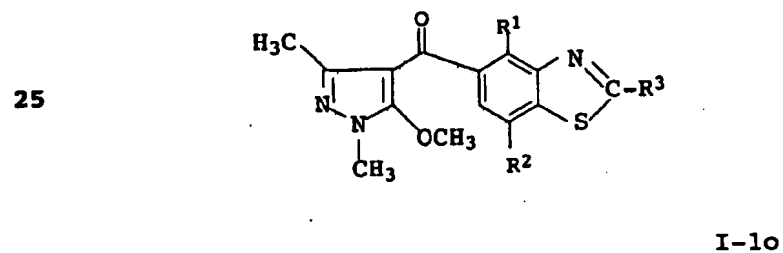
Verbindungen der allgemeinen Formel I-lm, in der die Substituenten R₁, R₂ und R₃ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

5 - Tabelle 14: Verbindungen I-ln.1 bis I-ln.810



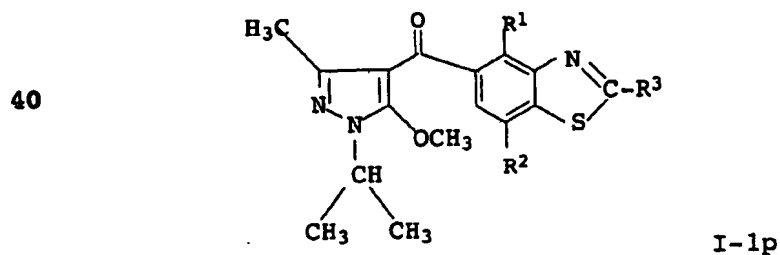
15 Verbindungen der allgemeinen Formel I-ln, in der die Substituenten R₁, R₂ und R₃ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

20 - Tabelle 15: Verbindungen I-lo.1 bis I-lo.810



30 Verbindungen der allgemeinen Formel I-lp, in der die Substituenten R₁, R₂ und R₃ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

35 - Tabelle 16: Verbindungen I-lp.1 bis I-lp.810

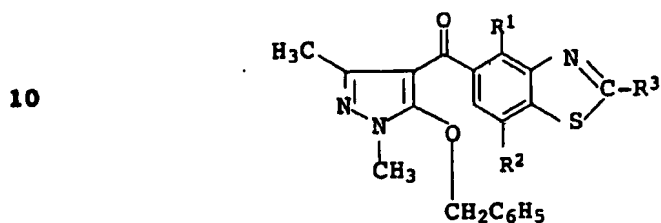


45

69

Verbindungen der allgemeinen Formel I-1p, in der die Substituenten R¹, R² und R³ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

5 - Tabelle 17: Verbindungen I-1q.1 bis I-1q.810

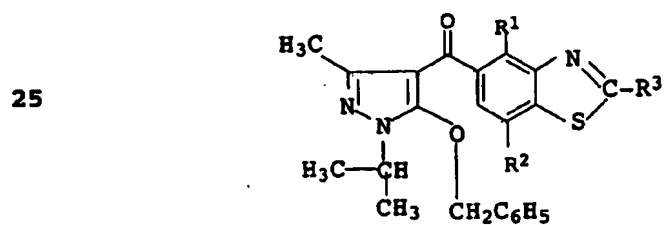


I-1q

15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-1g, in der die Substituenten R¹, R² und R³ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

20 - Tabelle 18: Verbindungen I-1r.1 bis I-1r.810

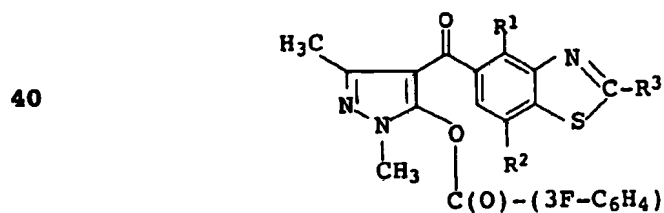


I-1r

30

Verbindungen der allgemeinen Formel I-1r, in der die Substituenten R¹, R² und R³ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

35 - Tabelle 19: Verbindungen I-1s.1 bis I-1s.810



I-1s

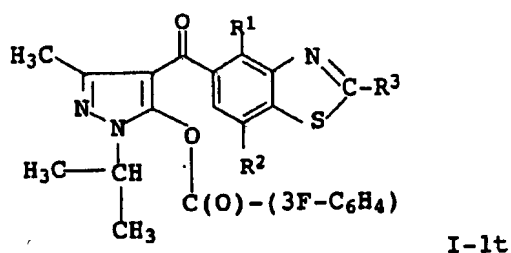
45

70

Verbindungen der allgemeinen Formel I-1s, in der die Substituenten R¹, R² und R³ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

5 - Tabelle 20: Verbindungen I-1t.1 bis I-1t.810

10

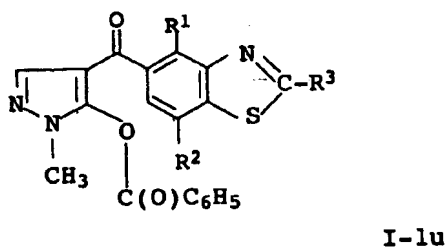


15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-1t, in der die Substituenten R¹, R² und R³ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

20 - Tabelle 20a: Verbindungen I-1u.1 bis I-1u.810

25

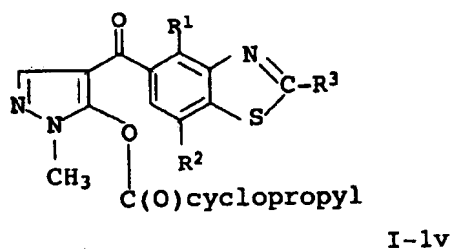


30

Verbindungen der allgemeinen Formel I-1u, in der die Substituenten R¹, R² und R³ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

35 - Tabelle 20b: Verbindungen I-1v.1 bis I-1v.810

40



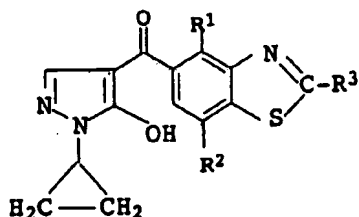
45

71

Verbindungen der allgemeinen Formel I-1v, in der die Substituenten R₁, R₂ und R₃ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

5 - Tabelle 20c: Verbindungen I-1w.1 bis I-1w.810

10



I-1w

15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-1w, in der die Substituenten R₁, R₂ und R₃ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

20 Beispiele für erfindungsgemäß besonders bevorzugte Pyrazolylderivate sind die Benzothiazol-S-dioxidverbindungen 1-1'a.1 bis 1-1'a.810, 1-1'b.1 bis 1-1'b.810, 1-1'w.1 bis 1-1'w.810 (Verbindungen I-1' = Verbindungen I mit X = C-R₃ und Y = SO₂). Sie unterscheiden sich von den in den Tabellen 1 bis 21 auf-

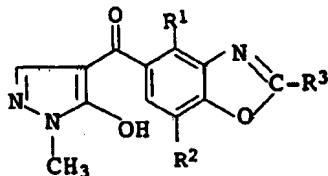
25 geführten Benzothiazolverbindungen 1-1a.1 bis 1-1a.810, 1-1b.1 bis 1-1b.810, 1-1w.1 bis 1-1w.810 darin, daß das heterocyclische Schwefelatom als SO₂-Gruppe vorliegt.

Beispiele für erfindungsgemäße besonders bevorzugte Pyrazolylderivate von Benzoxazol-5-carbonylverbindungen (Verbindungen I-2 = Verbindungen I mit X = C-R₃ und Y = O) sind die in den Tabellen 21 bis 40 genannten Verbindungen.

- Tabelle 21: Verbindungen I-2a.1 bis I-2a.810

35

40



I-2a

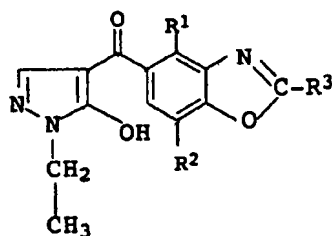
45

72

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2a, in der die Substituenten R1, R2 und R3 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

5 - Tabelle 22: Verbindungen I-2b.1 bis I-2b.810

10



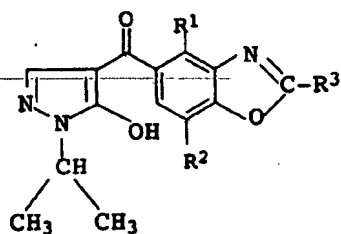
I-2b

15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2b, in der die Substituenten R1, R2 und R3 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

20 - Tabelle 23: Verbindungen I-2c.1 bis I-2c.810

25



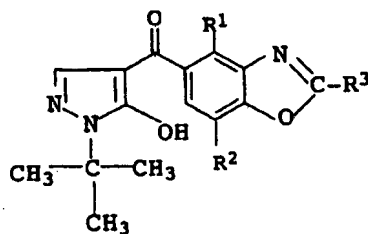
I-2c

30

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2c, in der die Substituenten R1, R2 und R3 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

35 - Tabelle 24: Verbindungen I-2d.1 bis I-2d.810

40



I-2d

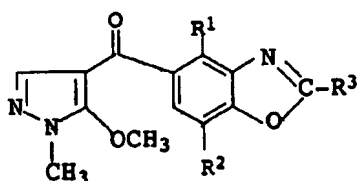
45

73

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2b, in der die Substituenten R₁, R₂ und R₃ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

5 - Tabelle 25: Verbindungen I-2e.1 bis I-2e.810

10



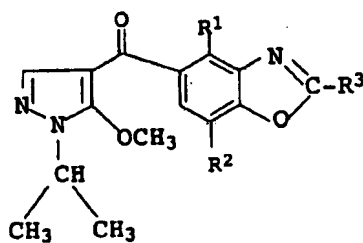
I-1e

15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-1e, in der die Substituenten R₁, R₂ und R₃ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

20 - Tabelle 26: Verbindungen I-2f.1 bis I-2f.810

25



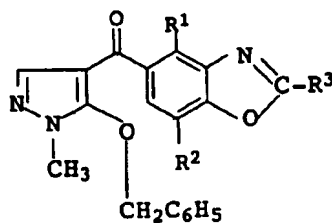
I-2f

30

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2f, in der die Substituenten R₁, R₂ und R₃ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

35 - Tabelle 27: Verbindungen I-2g.1 bis I-2g.810

40



I-2g

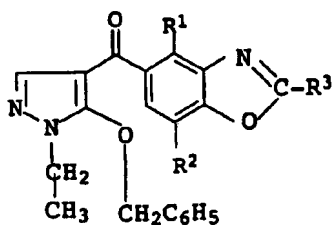
45

74

Verbindungen der allgemeinen Formel I-22g, in der die Substituenten R¹, R² und R³ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

5 - Tabelle 28: Verbindungen I-2h.1 bis I-2h.810

10



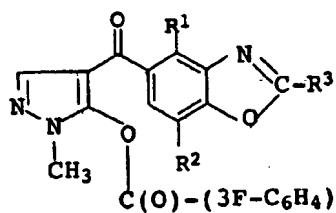
I-2h

15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2h, in der die Substituenten R¹, R² und R³ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

20 - Tabelle 29: Verbindungen I-2i.1 bis I-2i.810

25



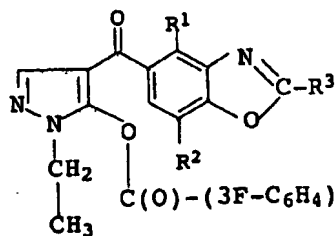
I-2i

30

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2i, in der die Substituenten R¹, R² und R³ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

35 - Tabelle 30: Verbindungen I-2k.1 bis I-2k.810

40



I-2k

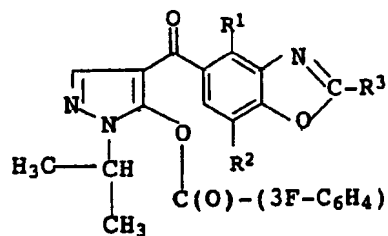
45

75

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2k, in der die Substituenten R₁, R₂ und R₃ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

5 - Tabelle 31: Verbindungen I-2l.1 bis I-2l.810

10



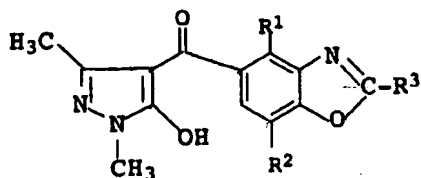
I-2l

15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2l, in der die Substituenten R₁, R₂ und R₃ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

20 - Tabelle 32: Verbindungen I-2m.1 bis I-2m.810

25



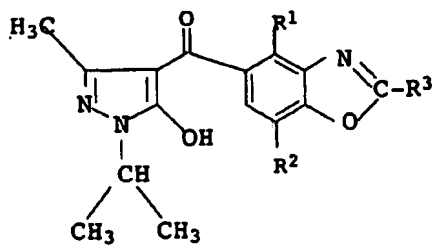
I-2m

30

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2m, in der die Substituenten R₁, R₂ und R₃ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

35 - Tabelle 33: Verbindungen I-2n.1 bis I-2n.810

40



I-2n

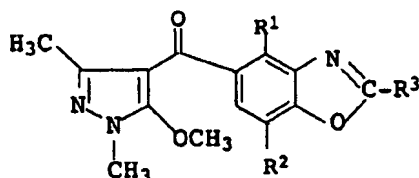
45

76

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2n, in der die Substituenten R₁, R₂ und R₃ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

5 - Tabelle 34: Verbindungen I-2o.1 bis I-2o.810

10



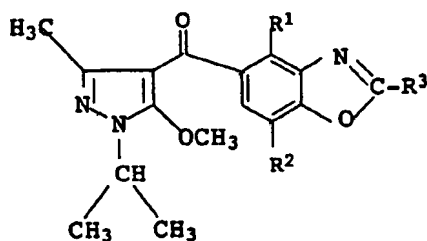
I-2o

15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2o, in der die Substituenten R₁, R₂ und R₃ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

20 - Tabelle 35: Verbindungen I-2p.1 bis I-2p.810

25



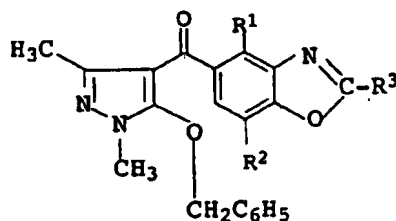
I-2p

30

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2p, in der die Substituenten R₁, R₂ und R₃ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

35 - Tabelle 36: Verbindungen I-2q.1 bis I-2q.810

40



I-2q

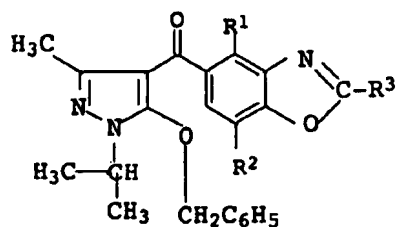
45

77

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2q, in der die Substituenten R1, R2 und R3 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

5 - Tabelle 37: Verbindungen I-2r.1 bis I-2r.810

10



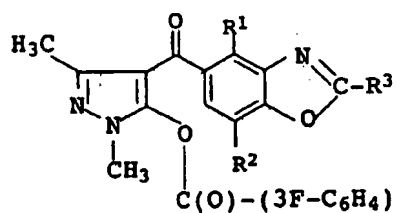
I-2r

15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2r, in der die Substituenten R1, R2 und R3 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

20 - Tabelle 38: Verbindungen I-2s.1 bis I-2s.810

25



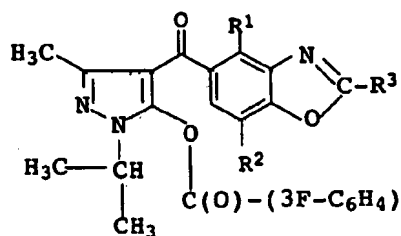
I-2s

30

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2s, in der die Substituenten R1, R2 und R3 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

35 - Tabelle 39: Verbindungen I-2t.1 bis I-2t.810

40



I-2t

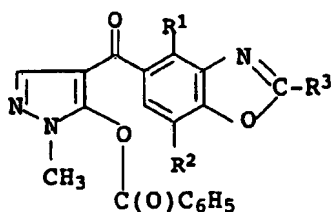
45

70

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2t, in der die Substituenten R¹, R² und R³ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

5 - Tabelle 39a: Verbindungen I-2u.1 bis I-2u.810

10



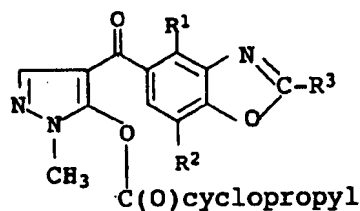
I-2u

15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2u, in der die Substituenten R¹, R² und R³ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

20 - Tabelle 39b: Verbindungen I-2v.1 bis I-2v.810

25



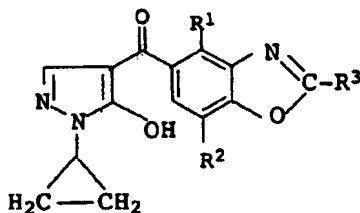
I-2v

30

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2v, in der die Substituenten R¹, R² und R³ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

35 - Tabelle 39c: Verbindungen I-2w.1 bis I-2w.810

40



I-2w

45

79

Verbindungen der allgemeinen Formel I-2w, in der die Substituenten R¹, R² und R³ für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle A entsprechen.

5 In der folgenden Tabelle B sind besonders bevorzugte Kombinationen R¹, R², R³ und R⁴ für erfindungsgemäße Pyrazolderivate der allgemeinen Formel I angegeben, die sich von Benzimidazol-5-carbonsäuren ableiten.

10**15****20****25****30****35****40****45**

Tabelle B

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴
5	1 CH ₃	CH ₃	CH ₃	H
	2 C ₂ H ₅	CH ₃	CH ₃	H
	3 n-C ₃ H ₇	CH ₃	CH ₃	H
	4 i-C ₃ H ₇	CH ₃	CH ₃	H
10	5 n-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃	H
	6 s-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃	H
	7 i-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃	H
	8 t-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃	H
15	9 CH ₂ Cl	CH ₃	CH ₃	H
	10 CHCl ₂	CH ₃	CH ₃	H
	11 CCl ₃	CH ₃	CH ₃	H
	12 CH ₂ F	CH ₃	CH ₃	H
20	13 CHF ₂	CH ₃	CH ₃	H
	14 CF ₃	CH ₃	CH ₃	H
	15 CH ₂ CF ₃	CH ₃	CH ₃	H
	16 CH ₂ OCH ₃	CH ₃	CH ₃	H
25	17 CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₃	CH ₃	H
	18 CH ₂ NH ₂	CH ₃	CH ₃	H
	19 (CH ₂) ₂ COCH ₃	CH ₃	CH ₃	H
	20 Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
30	21 2-F-Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	22 3-F-Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	23 4-F-Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	24 2-Cl-Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
35	25 3-Cl-Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	26 4-Cl-Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	27 2-OH-Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	28 3-OH-Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
40	29 4-OH-Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	30 2-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	31 3-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	32 4-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
45	33 2-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	34 3-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	35 4-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	36 2-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	H

91

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴
	3-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	4-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
5	39 2-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	40 3-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	41 4-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	42 2-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
10	43 3-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	44 4-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	45 2-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	46 3-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
	47 4-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	H
15	48 2-Pyridyl	CH ₃	CH ₃	H
	49 3-Pyridyl	CH ₃	CH ₃	H
	50 4-Pyridyl	CH ₃	CH ₃	H
	51 Cyclohexylamino	CH ₃	CH ₃	H
20	52 Cyclopentylamino	CH ₃	CH ₃	H
	53 H	OCH ₃	CH ₃	H
	54 CH ₃	OCH ₃	CH ₃	H
	55 C ₂ H ₅	OCH ₃	CH ₃	H
25	56 n-C ₃ H ₇	OCH ₃	CH ₃	H
	57 i-C ₃ H ₇	OCH ₃	CH ₃	H
	58 n-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃	H
	59 s-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃	H
	60 i-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃	H
30	61 t-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃	H
	62 CH ₂ Cl	OCH ₃	CH ₃	H
	63 CHCl ₂	OCH ₃	CH ₃	H
	64 CCl ₃	OCH ₃	CH ₃	H
35	65 CH ₂ F	OCH ₃	CH ₃	H
	66 CHF ₂	OCH ₃	CH ₃	H
	67 CF ₃	OCH ₃	CH ₃	H
	68 CH ₂ CF ₃	OCH ₃	CH ₃	H
40	69 CH ₂ OCH ₃	OCH ₃	CH ₃	H
	70 CH ₂ OCH ₂ CH ₃	OCH ₃	CH ₃	H
	71 CH ₂ NH ₂	OCH ₃	CH ₃	H
	72 (CH ₂) ₂ COCH ₃	OCH ₃	CH ₃	H
45	73 Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	74 2-F-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	75 3-F-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H

82

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
5	76	4-F-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	77	2-Cl-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	78	3-Cl-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	79	4-Cl-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	80	2-OH-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
10	81	3-OH-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	82	4-OH-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	83	2-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	84	3-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	85	4-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
15	86	2-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	87	3-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	88	4-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	89	2-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	90	3-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
20	91	4-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	92	2-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	93	3-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	94	4-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	25	95	2-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
96		3-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
97		4-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
98		2-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
99		3-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
30	00	4-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	H
	101	2-Pyridyl	OCH ₃	CH ₃	H
	102	3-Pyridyl	OCH ₃	CH ₃	H
	103	4-Pyridyl	OCH ₃	CH ₃	H
	35	104	Cyclohexylamino	OCH ₃	CH ₃
105		Cyclopentylamino	OCH ₃	CH ₃	H
106		H	Cl	CH ₃	H
107		CH ₃	Cl	CH ₃	H
40		108	C ₂ H ₅	Cl	CH ₃
	109	n-C ₃ H ₇	Cl	CH ₃	H
	110	i-C ₃ H ₇	Cl	CH ₃	H
	111	n-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃	H
	45	112	s-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃
113		i-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃	H
114		t-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃	H

Ø3

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
	115	CH ₂ Cl	Cl	CH ₃	H
	116	CHCl ₂	Cl	CH ₃	H
5	117	CCl ₃	Cl	CH ₃	H
	118	CH ₂ F	Cl	CH ₃	H
	119	CHF ₂	Cl	CH ₃	H
	120	CF ₃	Cl	CH ₃	H
10	121	CH ₂ CF ₃	Cl	CH ₃	H
	122	CH ₂ OCH ₃	Cl	CH ₃	H
	123	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	Cl	CH ₃	H
	124	CH ₂ NH ₂	Cl	CH ₃	H
	125	(CH ₂) ₂ COCH ₃	Cl	CH ₃	H
15	126	Phenyl	Cl	CH ₃	H
	127	2-F-Phenyl	Cl	CH ₃	H
	128	3-F-Phenyl	Cl	CH ₃	H
	129	4-F-Phenyl	Cl	CH ₃	H
20	130	2-Cl-Phenyl	Cl	CH ₃	H
	131	3-Cl-Phenyl	Cl	CH ₃	H
	132	4-Cl-Phenyl	Cl	CH ₃	H
	133	2-OH-Phenyl	Cl	CH ₃	H
25	134	3-OH-Phenyl	Cl	CH ₃	H
	135	4-OH-Phenyl	Cl	CH ₃	H
	136	2-OCH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	H
	137	3-OCH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	H
	138	4-OCH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	H
30	139	2-OCF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	H
	140	3-OCF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	H
	141	4-OCF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	H
	142	2-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	H
35	143	3-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	H
	144	4-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	H
	145	2-CF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	H
	146	3-CF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	H
40	147	4-CF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	H
	148	2-CH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	H
	149	3-CH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	H
	150	4-CH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	H
45	151	2-NO ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	H
	152	3-NO ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	H
	153	4-NO ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	H

84

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
5	154	2-Pyridyl	Cl	CH ₃	H
	155	3-Pyridyl	Cl	CH ₃	H
	156	4-Pyridyl	Cl	CH ₃	H
	157	Cyclohexylamino	Cl	CH ₃	H
	158	Cyclopentylamino	Cl	CH ₃	H
10	159	CH ₃	CH ₃	H	H
	160	C ₂ H ₅	CH ₃	H	H
	161	n-C ₃ H ₇	CH ₃	H	H
	162	i-C ₃ H ₇	CH ₃	H	H
	163	n-C ₄ H ₉	CH ₃	H	H
15	164	s-C ₄ H ₉	CH ₃	H	H
	165	i-C ₄ H ₉	CH ₃	H	H
	166	t-C ₄ H ₉	CH ₃	H	H
	167	CH ₂ Cl	CH ₃	H	H
	168	CHCl ₂	CH ₃	H	H
20	169	CCl ₃	CH ₃	H	H
	170	CH ₂ F	CH ₃	H	H
	171	CHF ₂	CH ₃	H	H
	172	CF ₃	CH ₃	H	H
	173	CH ₂ CF ₃	CH ₃	H	H
25	174	CH ₂ OCH ₃	CH ₃	H	H
	175	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₃	H	H
	176	CH ₂ NH ₂	CH ₃	H	H
	177	(CH ₂) ₂ COCH ₃	CH ₃	H	H
	178	Phenyl	CH ₃	H	H
30	179	2-F-Phenyl	CH ₃	H	H
	180	3-F-Phenyl	CH ₃	H	H
	181	4-F-Phenyl	CH ₃	H	H
	182	2-Cl-Phenyl	CH ₃	H	H
	183	3-Cl-Phenyl	CH ₃	H	H
35	184	4-Cl-Phenyl	CH ₃	H	H
	185	2-OH-Phenyl	CH ₃	H	H
	186	3-OH-Phenyl	CH ₃	H	H
	187	4-OH-Phenyl	CH ₃	H	H
	188	2-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	H
40	189	3-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	H
	190	4-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	H
	191	2-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	H
	192	3-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	H
	45	192	4-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	H

85

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴
5	193	4-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	H
	194	2-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	H
	195	3- OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	H
	196	4-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	H
	197	2-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	H
10	198	3-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	H
	199	4-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	H
	200	2-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	H
	201	3-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	H
	202	4-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	H
15	203	2-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	H
	204	3-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	H
	205	4-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	H
	206	2-Pyridyl	CH ₃	H
	207	3-Pyridyl	CH ₃	H
20	208	4-Pyridyl	CH ₃	H
	209	Cyclohexylamino	CH ₃	H
	210	Cyclopentylamino	CH ₃	H
	211	H	OCH ₃	H
	212	CH ₃	OCH ₃	H
25	213	C ₂ H ₅	OCH ₃	H
	214	n-C ₃ H ₇	OCH ₃	H
	215	i-C ₃ H ₇	OCH ₃	H
	216	n-C ₄ H ₉	OCH ₃	H
	217	s-C ₄ H ₉	OCH ₃	H
30	218	i-C ₄ H ₉	OCH ₃	H
	219	t-C ₄ H ₉	OCH ₃	H
	220	CH ₂ Cl	OCH ₃	H
	221	CHCl ₂	OCH ₃	H
	222	CCl ₃	OCH ₃	H
35	223	CH ₂ F	OCH ₃	H
	224	CHF ₂	OCH ₃	H
	225	CF ₃	OCH ₃	H
	226	CH ₂ CF ₃	OCH ₃	H
	227	CH ₂ OCH ₃	OCH ₃	H
40	228	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	OCH ₃	H
	229	CH ₂ NH ₂	OCH ₃	H
	230	(CH ₂) ₂ COCH ₃	OCH ₃	H
	231	Phenyl	OCH ₃	H

86

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴
5	232	2-F-Phenyl	OCH ₃	H
	233	3-F-Phenyl	OCH ₃	H
	234	4-F-Phenyl	OCH ₃	H
	235	2-Cl-Phenyl	OCH ₃	H
	236	3-Cl-Phenyl	OCH ₃	H
10	237	4-Cl-Phenyl	OCH ₃	H
	238	2-OH-Phenyl	OCH ₃	H
	239	3-OH-Phenyl	OCH ₃	H
	240	4-OH-Phenyl	OCH ₃	H
	241	2-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
15	242	3-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	243	4-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	244	2-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	245	3-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	246	4-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
20	247	2-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	H
	248	3-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	H
	249	4-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	H
	250	2-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	251	3-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
25	252	4-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	253	2-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	254	3-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	255	4-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H
	256	2-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	H
30	257	3-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	H
	258	4-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	H
	259	2-Pyridyl	OCH ₃	H
	260	3-Pyridyl	OCH ₃	H
	261	4-Pyridyl	OCH ₃	H
35	262	Cyclohexylamino	OCH ₃	H
	263	Cyclopentylamino	OCH ₃	H
	264	H	Cl	H
	265	CH ₃	Cl	H
	266	C ₂ H ₅	Cl	H
40	267	n-C ₃ H ₇	Cl	H
	268	i-C ₃ H ₇	Cl	H
	269	n-C ₄ H ₉	Cl	H
	270	s-C ₄ H ₉	Cl	H

67

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴
5	271	i-C ₄ H ₉	Cl	H
	272	t-C ₄ H ₉	Cl	H
	273	CH ₂ Cl	Cl	H
	274	CHCl ₂	Cl	H
	275	CCl ₃	Cl	H
10	276	CH ₂ F	Cl	H
	277	CHF ₂	Cl	H
	278	CF ₃	Cl	H
	279	CH ₂ CF ₃	Cl	H
15	280	CH ₂ OCH ₃	Cl	H
	281	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	Cl	H
	282	CH ₂ NH ₂	Cl	H
	283	(CH ₂) ₂ COCH ₃	Cl	H
	284	Phenyl	Cl	H
20	285	2-F-Phenyl	Cl	H
	286	3-F-Phenyl	Cl	H
	287	4-F-Phenyl	Cl	H
	288	2-Cl-Phenyl	Cl	H
	289	3-Cl-Phenyl	Cl	H
25	290	4-Cl-Phenyl	Cl	H
	291	2-OH-Phenyl	Cl	H
	292	3-OH-Phenyl	Cl	H
	293	4-OH-Phenyl	Cl	H
30	294	2-OCH ₃ -Phenyl	Cl	H
	295	3-OCH ₃ -Phenyl	Cl	H
	296	4-OCH ₃ -Phenyl	Cl	H
	297	2-OCF ₃ -Phenyl	Cl	H
35	298	3-OCF ₃ -Phenyl	Cl	H
	299	4-OCF ₃ -Phenyl	Cl	H
	300	2-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	H
	301	3-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	H
40	302	4-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	H
	303	2-CF ₃ -Phenyl	Cl	H
	304	3-CF ₃ -Phenyl	Cl	H
	305	4-CF ₃ -Phenyl	Cl	H
45	306	2-CH ₃ -Phenyl	Cl	H
	307	3-CH ₃ -Phenyl	Cl	H
	308	4-CH ₃ -Phenyl	Cl	H
	309	2-NO ₂ -Phenyl	Cl	H

88

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴
	3-NO ₂ -Phenyl	Cl	H	H
	4-NO ₂ -Phenyl	Cl	H	H
5	2-Pyridyl	Cl	H	H
	3-Pyridyl	Cl	H	H
	4-Pyridyl	Cl	H	H
	Cyclohexylamino	Cl	H	H
	Cyclopentylamino	Cl	H	H
10	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	C ₂ H ₅	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	n-C ₃ H ₇	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	i-C ₃ H ₇	CH ₃	CH ₃	CH ₃
15	n-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	s-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	i-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	t-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃	CH ₃
20	CH ₂ Cl	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	CHCl ₂	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	CCl ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	CH ₂ F	CH ₃	CH ₃	CH ₃
25	CHF ₂	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	CF ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	CH ₂ CF ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	CH ₂ OCH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃
30	CH ₂ NH ₂	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	(CH ₂) ₂ COCH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	Phenyl	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	2-F-Phenyl	CH ₃	CH ₃	CH ₃
35	3-F-Phenyl	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	4-F-Phenyl	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	2-Cl-Phenyl	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	3-Cl-Phenyl	CH ₃	CH ₃	CH ₃
40	4-Cl-Phenyl	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	2-OH-Phenyl	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	3-OH-Phenyl	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	4-OH-Phenyl	CH ₃	CH ₃	CH ₃
45	2-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	3-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	CH ₃
	4-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	CH ₃

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴
	349	2-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃
	350	3-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃
5	351	4-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃
	352	2-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃
	353	3-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃
	354	4-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃
10	355	2-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃
	356	3-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃
	357	4-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃
	358	2-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃
	359	3-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃
15	360	4-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃
	361	2-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃
	362	3-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃
	363	4-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃
20	364	2-Pyridyl	CH ₃	CH ₃
	365	3-Pyridyl	CH ₃	CH ₃
	366	4-Pyridyl	CH ₃	CH ₃
	367	Cyclohexylamino	CH ₃	CH ₃
25	368	Cyclopentylamino	CH ₃	CH ₃
	369	H	OCH ₃	CH ₃
	370	CH ₃	OCH ₃	CH ₃
	371	C ₂ H ₅	OCH ₃	CH ₃
	372	n-C ₃ H ₇	OCH ₃	CH ₃
30	373	i-C ₃ H ₇	OCH ₃	CH ₃
	374	n-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃
	375	s-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃
	376	i-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃
35	377	t-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃
	378	CH ₂ Cl	OCH ₃	CH ₃
	379	CHCl ₂	OCH ₃	CH ₃
	380	CCl ₃	OCH ₃	CH ₃
40	381	CH ₂ F	OCH ₃	CH ₃
	382	CHF ₂	OCH ₃	CH ₃
	383	CF ₃	OCH ₃	CH ₃
	384	CH ₂ CF ₃	OCH ₃	CH ₃
	385	CH ₂ OCH ₃	OCH ₃	CH ₃
45	386	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	OCH ₃	CH ₃
	387	CH ₂ NH ₂	OCH ₃	CH ₃

90

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴
	388	(CH ₂) ₂ COCH ₃	OCH ₃	CH ₃
	389	Phenyl	OCH ₃	CH ₃
5	390	2-F-Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	391	3-F-Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	392	4-F-Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	393	2-Cl-Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	394	3-Cl-Phenyl	OCH ₃	CH ₃
10	395	4-Cl-Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	396	2-OH-Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	397	3-OH-Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	398	4-OH-Phenyl	OCH ₃	CH ₃
15	399	2-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	400	3-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	401	4-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	402	2-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
20	403	3-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	404	4-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	405	2-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	406	3-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
25	407	4-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	408	2-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	409	3-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	410	4-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
30	411	2-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	412	3-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	413	4-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	414	2-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	415	3-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
35	416	4-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃
	417	2-Pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	418	3-Pyridyl	OCH ₃	CH ₃
	419	4-Pyridyl	OCH ₃	CH ₃
40	420	Cyclohexylamino	OCH ₃	CH ₃
	421	Cyclopentylamino	OCH ₃	CH ₃
	422	H	Cl	CH ₃
	423	CH ₃	Cl	CH ₃
45	424	C ₂ H ₅	Cl	CH ₃
	445	n-C ₃ H ₇	Cl	CH ₃
	426	i-C ₃ H ₇	Cl	CH ₃

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
	427	n-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃	CH ₃
	428	s-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃	CH ₃
5	429	i-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃	CH ₃
	430	t-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃	CH ₃
	431	CH ₂ Cl	Cl	CH ₃	CH ₃
	432	CHCl ₂	Cl	CH ₃	CH ₃
10	433	CCl ₃	Cl	CH ₃	CH ₃
	434	CH ₂ F	Cl	CH ₃	CH ₃
	435	CHF ₂	Cl	CH ₃	CH ₃
	436	CF ₃	Cl	CH ₃	CH ₃
15	437	CH ₂ CF ₃	Cl	CH ₃	CH ₃
	438	CH ₂ OCH ₃	Cl	CH ₃	CH ₃
	439	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	Cl	CH ₃	CH ₃
	440	CH ₂ NH ₂	Cl	CH ₃	CH ₃
	441	(CH ₂) ₂ COCH ₃	Cl	CH ₃	CH ₃
20	442	Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	443	2-F-Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	444	3-F-Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	445	4-F-Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
25	446	2-Cl=Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	447	3-Cl-Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	448	4-Cl-Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	449	2-OH-Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
30	450	3-OH-Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	451	4-OH-Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	452	2-OCH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	453	3-OCH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
35	454	4-OCH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	455	2-OCF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	456	3-OCF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	457	4-OCF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	458	2-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
40	459	3-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	460	4-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	461	2-CF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	462	3-CF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
45	463	4-CF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	464	2-CH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	465	3-CH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴
	4-CH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	2-NO ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
5	468 3-NO ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	469 4-NO ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	470 2-Pyridyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	471 3-Pyridyl	Cl	CH ₃	CH ₃
10	472 4-Pyridyl	Cl	CH ₃	CH ₃
	473 Cyclohexylamino	Cl	CH ₃	CH ₃
	474 Cyclopentylamino	Cl	CH ₃	CH ₃
	475 CH ₃	CH ₃	H	CH ₃
	476 C ₂ H ₅	CH ₃	H	CH ₃
15	477 n-C ₃ H ₇	CH ₃	H	CH ₃
	478 i-C ₃ H ₇	CH ₃	H	CH ₃
	479 n-C ₄ H ₉	CH ₃	H	CH ₃
	480 s-C ₄ H ₉	CH ₃	H	CH ₃
20	481 i-C ₄ H ₉	CH ₃	H	CH ₃
	482 t-C ₄ H ₉	CH ₃	H	CH ₃
	483 CH ₂ Cl	CH ₃	H	CH ₃
	484 CHCl ₂	CH ₃	H	CH ₃
25	485 CCl ₃	CH ₃	H	CH ₃
	486 CH ₂ F	CH ₃	H	CH ₃
	487 CHF ₂	CH ₃	H	CH ₃
	488 CF ₃	CH ₃	H	CH ₃
	489 CH ₂ CF ₃	CH ₃	H	CH ₃
30	490 CH ₂ OCH ₃	CH ₃	H	CH ₃
	491 CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₃	H	CH ₃
	492 CH ₂ NH ₂	CH ₃	H	CH ₃
	493 (CH ₂) ₂ COCH ₃	CH ₃	H	CH ₃
35	494 Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	495 2-F-Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	496 3-F-Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	497 4-F-Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
40	498 2-Cl-Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	499 3-Cl-Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	500 4-Cl-Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	501 2-OH-Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	502 3-OH-Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
45	503 4-OH-Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	504 2-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	CH ₃

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
5	505	3-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	506	4-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	507	2-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	508	3-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	509	4-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
10	510	2-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	511	3- OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	512	4-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	513	2-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	514	3-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
15	515	4-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	516	2-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	517	3-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	518	4-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	519	2-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
20	520	3-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	521	4-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	H	CH ₃
	522	2-Pyridyl	CH ₃	H	CH ₃
	523	3-Pyridyl	CH ₃	H	CH ₃
	524	4-Pyridyl	CH ₃	H	CH ₃
25	525	Cyclohexylamino	CH ₃	H	CH ₃
	526	Cyclopentylamino	CH ₃	H	CH ₃
	527	H	OCH ₃	H	CH ₃
	528	CH ₃	OCH ₃	H	CH ₃
	529	C ₂ H ₅	OCH ₃	H	CH ₃
30	530	n-C ₃ H ₇	OCH ₃	H	CH ₃
	531	i-C ₃ H ₇	OCH ₃	H	CH ₃
	532	n-C ₄ H ₉	OCH ₃	H	CH ₃
	533	s-C ₄ H ₉	OCH ₃	H	CH ₃
	534	i-C ₄ H ₉	OCH ₃	H	CH ₃
35	535	t-C ₄ H ₉	OCH ₃	H	CH ₃
	536	CH ₂ Cl	OCH ₃	H	CH ₃
	537	CHCl ₂	OCH ₃	H	CH ₃
	538	CCl ₃	OCH ₃	H	CH ₃
	539	CH ₂ F	OCH ₃	H	CH ₃
40	540	CHF ₂	OCH ₃	H	CH ₃
	541	CF ₃	OCH ₃	H	CH ₃
	542	CH ₂ CF ₃	OCH ₃	H	CH ₃
	543	CH ₂ OCH ₃	OCH ₃	H	CH ₃
	543	CH ₂ OCH ₃	OCH ₃	H	CH ₃

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
	544	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	OCH ₃	H	CH ₃
	545	CH ₂ NH ₂	OCH ₃	H	CH ₃
5	546	(CH ₂) ₂ COCH ₃	OCH ₃	H	CH ₃
	547	Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	548	2-F-Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	549	3-F-Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	550	4-F-Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
10	551	2-Cl-Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	552	3-Cl-Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	553	4-Cl-Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	554	2-OH-Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
15	555	3-OH-Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	556	4-OH-Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	557	2-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	558	3-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
20	559	4-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	560	2-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	561	3-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	562	4-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	563	2-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
25	564	3-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	565	4-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	566	2-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	567	3-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
30	568	4-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	569	2-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	570	3-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	571	4-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
35	572	2-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	573	3-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	574	4-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	CH ₃
	575	2-Pyridyl	OCH ₃	H	CH ₃
40	576	3-Pyridyl	OCH ₃	H	CH ₃
	577	4-Pyridyl	OCH ₃	H	CH ₃
	578	Cyclohexylamino	OCH ₃	H	CH ₃
	579	Cyclopentylamino	OCH ₃	H	CH ₃
45	580	H	Cl	H	CH ₃
	581	CH ₃	Cl	H	CH ₃
	582	C ₂ H ₅	Cl	H	CH ₃

95

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
	583	n-C ₃ H ₇	Cl	H	CH ₃
	584	i-C ₃ H ₇	Cl	H	CH ₃
5	585	n-C ₄ H ₉	Cl	H	CH ₃
	586	s-C ₄ H ₉	Cl	H	CH ₃
	587	i-C ₄ H ₉	Cl	H	CH ₃
	588	t-C ₄ H ₉	Cl	H	CH ₃
10	589	CH ₂ Cl	Cl	H	CH ₃
	590	CHCl ₂	Cl	H	CH ₃
	591	CCl ₃	Cl	H	CH ₃
	592	CH ₂ F	Cl	H	CH ₃
	593	CHF ₂	Cl	H	CH ₃
15	594	CF ₃	Cl	H	CH ₃
	595	CH ₂ CF ₃	Cl	H	CH ₃
	596	CH ₂ OCH ₃	Cl	H	CH ₃
	597	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	Cl	H	CH ₃
20	598	CH ₂ NH ₂	Cl	H	CH ₃
	599	(CH ₂) ₂ COCH ₃	Cl	H	CH ₃
	600	Phenyl	Cl	H	CH ₃
	701	2-F-Phenyl	Cl	H	CH ₃
25	702	3-F-Phenyl	Cl	H	CH ₃
	703	4-F-Phenyl	Cl	H	CH ₃
	704	2-Cl-Phenyl	Cl	H	CH ₃
	705	3-Cl-Phenyl	Cl	H	CH ₃
	706	4-Cl-Phenyl	Cl	H	CH ₃
30	707	2-OH-Phenyl	Cl	H	CH ₃
	708	3-OH-Phenyl	Cl	H	CH ₃
	709	4-OH-Phenyl	Cl	H	CH ₃
	710	2-OCH ₃ -Phenyl	Cl	H	CH ₃
35	711	3-OCH ₃ -Phenyl	Cl	H	CH ₃
	712	4-OCH ₃ -Phenyl	Cl	H	CH ₃
	713	2-OCF ₃ -Phenyl	Cl	H	CH ₃
	714	3-OCF ₃ -Phenyl	Cl	H	CH ₃
40	715	4-OCF ₃ -Phenyl	Cl	H	CH ₃
	716	2-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	H	CH ₃
	717	3-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	H	CH ₃
	718	4-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	H	CH ₃
45	719	2-CF ₃ -Phenyl	Cl	H	CH ₃
	720	3-CF ₃ -Phenyl	Cl	H	CH ₃
	721	4-CF ₃ -Phenyl	Cl	H	CH ₃

30

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
5	722	2-CH ₃ -Phenyl	Cl	H	CH ₃
	723	3-CH ₃ -Phenyl	Cl	H	CH ₃
	724	4-CH ₃ -Phenyl	Cl	H	CH ₃
	725	2-NO ₂ -Phenyl	Cl	H	CH ₃
	726	3-NO ₂ -Phenyl	Cl	H	CH ₃
10	727	4-NO ₂ -Phenyl	Cl	H	CH ₃
	728	2-Pyridyl	Cl	H	CH ₃
	729	3-Pyridyl	Cl	H	CH ₃
	730	4-Pyridyl	Cl	H	CH ₃
	731	Cyclohexylamino	Cl	H	CH ₃
15	732	Cyclopentylamino	Cl	H	CH ₃
	733	CH ₃	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	734	C ₂ H ₅	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	735	n-C ₃ H ₇	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	736	i-C ₃ H ₇	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
20	737	n-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	738	s-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	739	i-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	740	t-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	741	CH ₂ Cl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
25	742	CHCl ₂	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	743	CCl ₃	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	744	CH ₂ F	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	745	CHF ₂	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	746	CF ₃	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
30	747	CH ₂ CF ₃	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	748	CH ₂ OCH ₃	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	749	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	750	CH ₂ NH ₂	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	751	(CH ₂) ₂ COCH ₃	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
35	752	Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	753	2-F-Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	754	3-F-Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	755	4-F-Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	756	2-Cl-Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
40	757	3-Cl-Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	758	4-Cl-Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	759	2-OH-Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	760	3-OH-Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	45				

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
5	761	4-OH-Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	762	2-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	763	3-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	764	4-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	765	2-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
10	766	3-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	767	4-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	768	2-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	769	3- OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	770	4-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
15	771	2-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	772	3-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	773	4-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	774	2-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	775	3-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
20	776	4-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	777	2-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	778	3-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	779	4-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	780	2-Pyridyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
25	781	3-Pyridyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	782	4-Pyridyl	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	783	Cyclohexylamino	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	784	Cyclopentylamino	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	785	H	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
30	786	CH ₃	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	787	C ₂ H ₅	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	788	n-C ₃ H ₇	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	789	i-C ₃ H ₇	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	790	n-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
35	791	s-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	792	i-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	793	t-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	794	CH ₂ Cl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	795	CHCl ₂	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
40	796	CCl ₃	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	797	CH ₂ F	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	798	CHF ₂	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
	799	CF ₃	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	800	CH ₂ CF ₃	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
5	801	CH ₂ OCH ₃	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	802	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	803	CH ₂ NH ₂	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	804	(CH ₂) ₂ COCH ₃	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
10	805	Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	806	2-F-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	807	3-F-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	808	4-F-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	809	2-Cl-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
15	810	3-Cl-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	811	4-Cl-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	812	2-OH-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	813	3-OH-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
20	814	4-OH-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	815	2-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	816	3-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	817	4-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
25	818	2-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	819	3-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	820	4-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	821	2-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	822	3-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
30	823	4-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	824	2-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	825	3-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	826	4-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
35	827	2-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	828	3-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	829	4-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	830	2-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
40	831	3-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	832	4-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	833	2-Pyridyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	834	3-Pyridyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	835	4-Pyridyl	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
45	836	Cyclohexylamino	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	837	Cyclopentylamino	OCH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
	838	H	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	839	CH ₃	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
5	840	C ₂ H ₅	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	841	n-C ₃ H ₇	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	842	i-C ₃ H ₇	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	843	n-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	844	s-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
10	845	i-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	846	t-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	847	CH ₂ Cl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	848	CHCl ₂	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
15	849	CCl ₃	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	850	CH ₂ F	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	851	CHF ₂	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	852	CF ₃	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
20	853	CH ₂ CF ₃	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	854	CH ₂ OCH ₃	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	855	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	856	CH ₂ NH ₂	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	857	(CH ₂) ₂ COCH ₃	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
25	858	Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	859	2-F-Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	860	3-F-Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	861	4-F-Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
30	862	2-Cl-Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	863	3-Cl-Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	864	4-Cl-Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	865	2-OH-Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
35	866	3-OH-Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	867	4-OH-Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	868	2-OCH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	869	3-OCH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
40	870	4-OCH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	871	2-OCF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	872	3-OCF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	873	4-OCF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	874	2-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
45	875	3-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	876	4-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅

100

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
5	877	2-CF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	878	3-CF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	879	4-CF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	880	2-CH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	881	3-CH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
10	882	4-CH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	883	2-NO ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	884	3-NO ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	885	4-NO ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	886	2-Pyridyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
15	887	3-Pyridyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	888	4-Pyridyl	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	889	Cyclohexylamino	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	890	Cyclopentylamino	Cl	CH ₃	C ₂ H ₅
	891	CH ₃	CH ₃	H	C ₂ H ₅
20	892	C ₂ H ₅	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	893	n-C ₃ H ₇	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	894	i-C ₃ H ₇	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	895	n-C ₄ H ₉	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	896	s-C ₄ H ₉	CH ₃	H	C ₂ H ₅
25	897	i-C ₄ H ₉	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	898	t-C ₄ H ₉	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	899	CH ₂ Cl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	900	CHCl ₂	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	901	CCl ₃	CH ₃	H	C ₂ H ₅
30	902	CH ₂ F	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	903	CHF ₂	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	904	CF ₃	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	905	CH ₂ CF ₃	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	906	CH ₂ OCH ₃	CH ₃	H	C ₂ H ₅
35	907	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	908	CH ₂ NH ₂	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	909	(CH ₂) ₂ COCH ₃	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	910	Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	911	2-F-Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
40	912	3-F-Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	913	4-F-Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	914	2-Cl-Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	915	3-Cl-Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅

101

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
5	916	4-Cl-Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	917	2-OH-Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	918	3-OH-Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	919	4-OH-Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	920	2-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
10	921	3-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	922	4-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	923	2-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	924	3-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	925	4-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
15	926	2-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	927	3-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	928	4-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	929	2-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	930	3-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
20	931	4-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	932	2-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	933	3-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	934	4-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	935	2-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
25	936	3-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	937	4-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	938	2-Pyridyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	939	3-Pyridyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	940	4-Pyridyl	CH ₃	H	C ₂ H ₅
30	941	Cyclohexylamino	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	942	Cyclopentylamino	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	943	H	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	944	CH ₃	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	945	C ₂ H ₅	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
35	946	n-C ₃ H ₇	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	947	i-C ₃ H ₇	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	948	n-C ₄ H ₉	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	949	s-C ₄ H ₉	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	950	i-C ₄ H ₉	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
40	951	t-C ₄ H ₉	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	952	CH ₂ Cl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	953	CHCl ₂	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	954	CCl ₃	OCH ₃	H	C ₂ H ₅

102

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
5	955	CH ₂ F	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	956	CHF ₂	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	957	CF ₃	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	958	CH ₂ CF ₃	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	959	CH ₂ OCH ₃	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
10	960	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	961	CH ₂ NH ₂	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	962	(CH ₂) ₂ COCH ₃	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	963	Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	964	2-F-Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
15	965	3-F-Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	966	4-F-Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	967	2-Cl-Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	968	3-Cl-Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	969	4-Cl-Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
20	970	2-OH-Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	971	3-OH-Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	972	4-OH-Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	973	2-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	974	3-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
25	975	4-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	976	2-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	977	3-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	978	4-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	979	2-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
30	980	3-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	981	4-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	982	2-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	983	3-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	984	4-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
35	985	2-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	986	3-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	987	4-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	988	2-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	989	3-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
40	990	4-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	991	2-Pyridyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	992	3-Pyridyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	993	4-Pyridyl	OCH ₃	H	C ₂ H ₅

103

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴
	Cyclohexylamino	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
	Cyclopentylamino	OCH ₃	H	C ₂ H ₅
5	H	Cl	H	C ₂ H ₅
	CH ₃	Cl	H	C ₂ H ₅
	C ₂ H ₅	Cl	H	C ₂ H ₅
	n-C ₃ H ₇	Cl	H	C ₂ H ₅
	i-C ₃ H ₇	Cl	H	C ₂ H ₅
10	n-C ₄ H ₉	Cl	H	C ₂ H ₅
	s-C ₄ H ₉	Cl	H	C ₂ H ₅
	i-C ₄ H ₉	Cl	H	C ₂ H ₅
	t-C ₄ H ₉	Cl	H	C ₂ H ₅
15	CH ₂ Cl	Cl	H	C ₂ H ₅
	CHCl ₂	Cl	H	C ₂ H ₅
	CCl ₃	Cl	H	C ₂ H ₅
	CH ₂ F	Cl	H	C ₂ H ₅
20	CHF ₂	Cl	H	C ₂ H ₅
	CF ₃	Cl	H	C ₂ H ₅
	CH ₂ CF ₃	Cl	H	C ₂ H ₅
	CH ₂ OCH ₃	Cl	H	C ₂ H ₅
25	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	Cl	H	C ₂ H ₅
	CH ₂ NH ₂	Cl	H	C ₂ H ₅
	(CH ₂) ₂ COCH ₃	Cl	H	C ₂ H ₅
	Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
30	2-F-Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	3-F-Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	4-F-Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	2-Cl-Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	3-Cl-Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
35	4-Cl-Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	2-OH-Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	3-OH-Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	4-OH-Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
40	2-OCH ₃ -Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	3-OCH ₃ -Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	4-OCH ₃ -Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	2-OCF ₃ -Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	3-OCF ₃ -Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
45	4-OCF ₃ -Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	2-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅

104

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
5	1032	3-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	1033	4-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	1034	2-CF ₃ -Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	1035	3-CF ₃ -Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	1036	4-CF ₃ -Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
10	1037	2-CH ₃ -Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	1038	3-CH ₃ -Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	1039	4-CH ₃ -Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	1040	2-NO ₂ -Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	1041	3-NO ₂ -Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
15	1042	4-NO ₂ -Phenyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	1043	2-Pyridyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	1044	3-Pyridyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	1045	4-Pyridyl	Cl	H	C ₂ H ₅
	1046	Cyclohexylamino	Cl	H	C ₂ H ₅
20	1047	Cyclopentylamino	Cl	H	C ₂ H ₅
	1048	CH ₃	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1049	C ₂ H ₅	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1050	n-C ₃ H ₇	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1051	i-C ₃ H ₇	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
25	1052	n-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1053	s-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1054	i-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1055	t-C ₄ H ₉	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1056	CH ₂ Cl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
30	1057	CHCl ₂	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1058	CCl ₃	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1059	CH ₂ F	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1060	CHF ₂	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1061	CF ₃	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
35	1062	CH ₂ CF ₃	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1063	CH ₂ OCH ₃	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1064	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1065	CH ₂ NH ₂	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1066	(CH ₂) ₂ COCH ₃	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
40	1067	Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1068	2-F-Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1069	3-F-Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1070	4-F-Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇

105

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
5	1071	2-Cl-Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1072	3-Cl-Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1073	4-Cl-Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1074	2-OH-Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1075	3-OH-Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
10	1076	4-OH-Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1077	2-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1078	3-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1079	4-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1080	2-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
15	1081	3-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1082	4-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1083	2-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1084	3- OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1085	4-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
20	1086	2-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1087	3-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1088	4-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1089	2-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1090	3-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
25	1091	4-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1092	2-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1093	3-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1094	4-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1095	2-Pyridyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
30	1096	3-Pyridyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1097	4-Pyridyl	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1098	Cyclohexylamino	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1099	Cyclopentylamino	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1100	H	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
35	1101	CH ₃	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1102	C ₂ H ₅	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1103	n-C ₃ H ₇	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1104	i-C ₃ H ₇	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1105	n-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
40	1106	s-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1107	i-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1108	t-C ₄ H ₉	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1109	CH ₂ Cl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇

106

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
5	1110	CHCl ₂	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1111	CCl ₃	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1112	CH ₂ F	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1113	CHF ₂	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1114	CF ₃	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
10	1115	CH ₂ CF ₃	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1116	CH ₂ OCH ₃	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1117	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
15	1118	CH ₂ NH ₂	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1119	(CH ₂) ₂ COCH ₃	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1120	Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1121	2-F-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1122	3-F-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
20	1123	4-F-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1124	2-Cl-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1125	3-Cl-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1126	4-Cl-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1127	2-OH-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
25	1128	3-OH-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1129	4-OH-Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1130	2-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1131	3-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1132	4-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
30	1133	2-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1134	3-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1135	4-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1136	2-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1137	3-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
35	1138	4-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1139	2-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1140	3-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
40	1141	4-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1142	2-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1143	3-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1144	4-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1145	2-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
45	1146	3-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1147	4-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1148	2-Pyridyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇

167

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
	1149	3-Pyridyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1150	4-Pyridyl	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
5	1151	Cyclohexylamino	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1152	Cyclopentylamino	OCH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1153	H	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1154	CH ₃	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
10	1155	C ₂ H ₅	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1156	n-C ₃ H ₇	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1157	i-C ₃ H ₇	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1158	n-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1159	s-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
15	1160	i-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1161	t-C ₄ H ₉	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1162	CH ₂ Cl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1163	CHCl ₂	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
20	1164	CCl ₃	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1165	CH ₂ F	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1166	CHF ₂	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1167	CF ₃	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
25	1168	CH ₂ CF ₃	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1169	CH ₂ OCH ₃	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1170	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1171	CH ₂ NH ₂	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1172	(CH ₂) ₂ COCH ₃	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
30	1173	Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1174	2-F-Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1175	3-F-Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1176	4-F-Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
35	1177	2-Cl-Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1178	3-Cl-Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1179	4-Cl-Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1180	2-OH-Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
40	1181	3-OH-Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1182	4-OH-Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1183	2-OCH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1184	3-OCH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
45	1185	4-OCH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1186	2-OCF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1187	3-OCF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇

108

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴
5	1188 4-OCF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1189 2-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1190 3-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1191 4-OCHF ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1192 2-CF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
10	1193 3-CF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1194 4-CF ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1195 2-CH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1196 3-CH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1197 4-CH ₃ -Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
15	1198 2-NO ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1199 3-NO ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1200 4-NO ₂ -Phenyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1201 2-Pyridyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1202 3-Pyridyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
20	1203 4-Pyridyl	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1204 Cyclohexylamino	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1205 Cyclopentylamino	Cl	CH ₃	i-C ₃ H ₇
	1206 CH ₃	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1207 C ₂ H ₅	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
25	1208 n-C ₃ H ₇	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1209 i-C ₃ H ₇	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1210 n-C ₄ H ₉	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1211 s-C ₄ H ₉	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1212 i-C ₄ H ₉	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
30	1213 t-C ₄ H ₉	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1214 CH ₂ Cl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1215 CHCl ₂	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1216 CCl ₃	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1217 CH ₂ F	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
35	1218 CHF ₂	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1219 CF ₃	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1220 CH ₂ CF ₃	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1221 CH ₂ OCH ₃	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1222 CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
40	1223 CH ₂ NH ₂	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1224 (CH ₂) ₂ COCH ₃	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1225 Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1226 2-F-Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇

109

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
	1227	3-F-Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1228	4-F-Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
5	1229	2-Cl-Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1230	3-Cl-Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1231	4-Cl-Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1232	2-OH-Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
10	1233	3-OH-Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1234	4-OH-Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1235	2-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1236	3-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1237	4-OCH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
15	1238	2-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1239	3-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1240	4-OCF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1241	2-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
20	1242	3-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1243	4-OCHF ₂ -Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1244	2-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1245	3-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
25	1246	4-CF ₃ -Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1247	2-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1248	3-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1249	4-CH ₃ -Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
30	1250	2-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1251	3-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1252	4-NO ₂ -Phenyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1253	2-Pyridyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1254	3-Pyridyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
35	1255	4-Pyridyl	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1256	Cyclohexylamino	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1257	Cyclopentylamino	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1258	H	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
40	1259	CH ₃	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1260	C ₂ H ₅	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1261	n-C ₃ H ₇	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1262	i-C ₃ H ₇	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
45	1263	n-C ₄ H ₉	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1264	s-C ₄ H ₉	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1265	i-C ₄ H ₉	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
	1266	t-C ₄ H ₉	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1267	CH ₂ Cl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
5	1268	CHCl ₂	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1269	CCl ₃	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1270	CH ₂ F	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1271	CHF ₂	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
10	1272	CF ₃	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1273	CH ₂ CF ₃	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1274	CH ₂ OCH ₃	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1275	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1276	CH ₂ NH ₂	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
15	1277	(CH ₂) ₂ COCH ₃	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1278	Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1279	2-F-Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1280	3-F-Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
20	1281	4-F-Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1282	2-Cl-Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1283	3-Cl-Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1284	4-Cl-Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
25	1285	2-OH-Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1286	3-OH-Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1287	4-OH-Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1288	2-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1289	3-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
30	1290	4-OCH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1291	2-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1292	3-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1293	4-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
35	1294	2-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1295	3-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1296	4-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1297	2-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
40	1298	3-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1299	4-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1300	2-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1301	3-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
45	1302	4-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1303	2-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1304	3-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇

III)

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
	1305	4-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1306	2-Pyridyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
5	1307	3-Pyridyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1308	4-Pyridyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1309	Cyclohexylamino	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1310	Cyclopentylamino	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
10	1311	H	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1312	CH ₃	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1313	C ₂ H ₅	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1314	n-C ₃ H ₇	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1315	i-C ₃ H ₇	Cl	H	i-C ₃ H ₇
15	1316	n-C ₄ H ₉	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1317	s-C ₄ H ₉	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1318	i-C ₄ H ₉	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1319	t-C ₄ H ₉	Cl	H	i-C ₃ H ₇
20	1320	CH ₂ Cl	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1321	CHCl ₂	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1322	CH ₃	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1323	CH ₂ F	Cl	H	i-C ₃ H ₇
25	1324	CHF ₂	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1325	CF ₃	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1326	CH ₂ CF ₃	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1327	CH ₂ OCH ₃	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1328	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	Cl	H	i-C ₃ H ₇
30	1329	CH ₂ NH ₂	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1330	(CH ₂) ₂ COCH ₃	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1331	Phenyl	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1332	2-F-Phenyl	Cl	H	i-C ₃ H ₇
35	1333	3-F-Phenyl	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1334	4-F-Phenyl	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1335	2-Cl-Phenyl	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1336	3-Cl-Phenyl	Cl	H	i-C ₃ H ₇
40	1337	4-Cl-Phenyl	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1338	2-OH-Phenyl	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1339	3-OH-Phenyl	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1340	4-OH-Phenyl	Cl	H	i-C ₃ H ₇
45	1341	2-OCH ₃ -Phenyl	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1342	3-OCH ₃ -Phenyl	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1343	4-OCH ₃ -Phenyl	Cl	H	i-C ₃ H ₇

112

	R ³	R ¹	R ²	R ⁴	
5	1344	2-OCF ₃ -Phenyl	Cl	H	i-C ₃ H ₇
	1345	3-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1346	4-OCF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1347	2-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1348	3-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
10	1349	4-OCHF ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1350	2-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1351	3-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1352	4-CF ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1353	2-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
15	1353	3-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1354	4-CH ₃ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1355	H	CH ₃	H	H
	1356	3-NO ₂ -Phenyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1357	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃
20	1358	2-Pyridyl	OCH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1359	H	CH ₃	CH ₃	C ₂ H ₅
	1360	H	CH ₃	H	C ₂ H ₅
	1361	H	CH ₃	CH ₃	i-C ₃ H ₇
25	1362	H	CH ₃	H	i-C ₃ H ₇
	1363	H	CH ₃	H	CH ₃

30

35

40

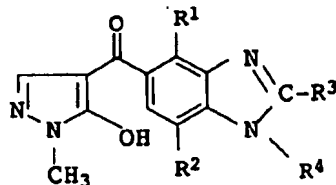
45

113

Beispiele für erfindungsgemäße besonders bevorzugte Benzimidazol-5-ylcarbonyl-Derivate von Pyrazolen (Verbindungen I-3 = Verbindungen I mit $X = C-R^3$ und $Y = N-R^4$) sind die in den Tabellen 40 bis 58 genannten Verbindungen.

- Tabelle 40: Verbindungen I-3a.1 bis I-3a.1363

10



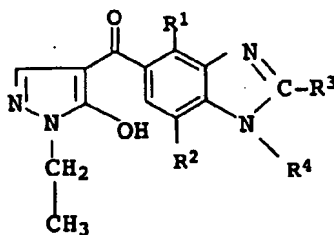
15

I-3a

Verbindungen der allgemeinen Formel I-3a, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer 20 Zeile der Tabelle B entsprechen.

- Tabelle 41: Verbindungen I-3b.1 bis I-3b.1363

25



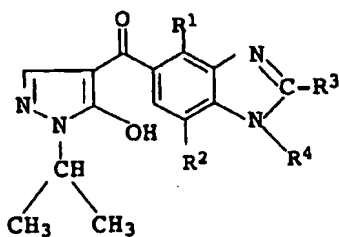
30

I-3b

Verbindungen der allgemeinen Formel I-3b, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer 35 Zeile der Tabelle B entsprechen.

- Tabelle 42: Verbindungen I-3c.1 bis I-3c.1363

40



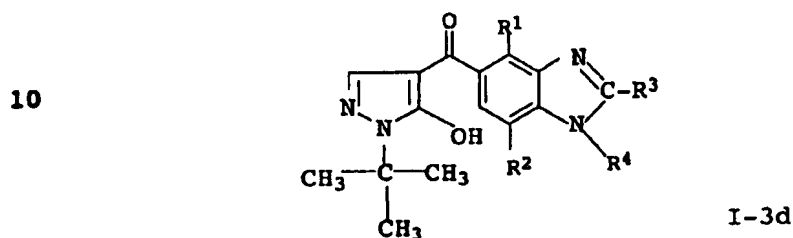
45

I-3c

114

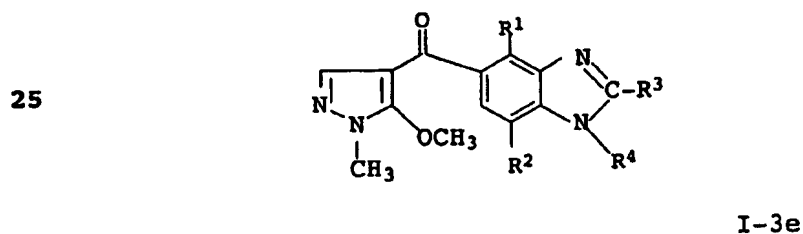
Verbindungen der allgemeinen Formel I-3c, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle B entsprechen.

5 - Tabelle 43: Verbindungen I-3d.1 bis I-3d.1363



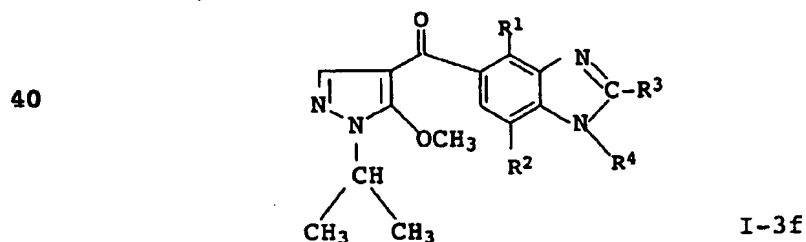
15 Verbindungen der allgemeinen Formel I-3d, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle B entsprechen.

20 - Tabelle 44: Verbindungen I-3e.1 bis I-3e.1363



30 Verbindungen der allgemeinen Formel I-3e, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle B entsprechen.

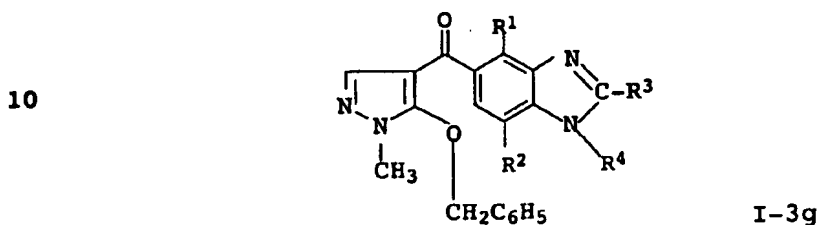
35 - Tabelle 45: Verbindungen I-3f.1 bis I-3f.1363



115

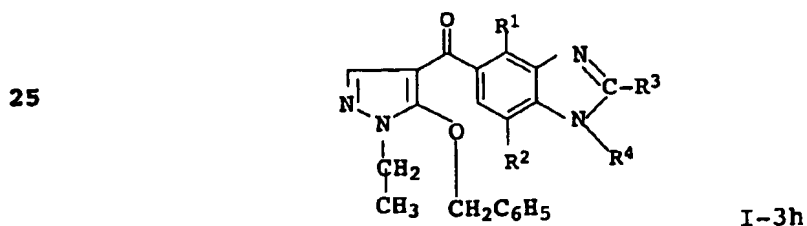
Verbindungen der allgemeinen Formel I-3f, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle B entsprechen.

5 - Tabelle 46: Verbindungen I-3g.1 bis I-3g.1363



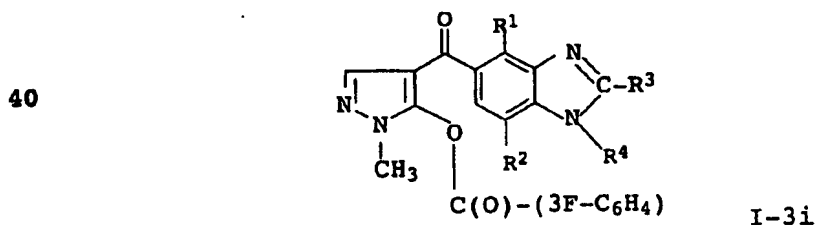
15 Verbindungen der allgemeinen Formel I-3g, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle B entsprechen.

20 - Tabelle 47: Verbindungen I-3h.1 bis I-3h.1363



30 Verbindungen der allgemeinen Formel I-3h, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle B entsprechen.

35 - Tabelle 48: Verbindungen I-3i.1 bis I-3i.1363



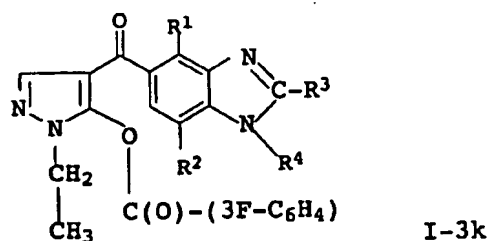
45

//6

Verbindungen der allgemeinen Formel I-3i, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle B entsprechen.

5 - Tabelle 49: Verbindungen I-3k.1 bis I-3k.1363

10

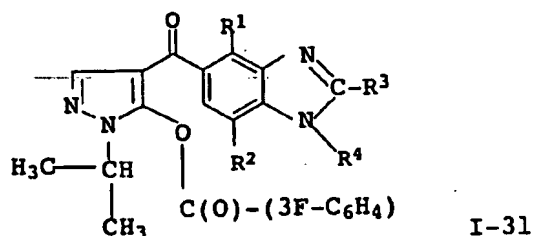


15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-3k, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle B entsprechen.

20 - Tabelle 50: Verbindungen I-3l.1 bis I-3l.1363

25

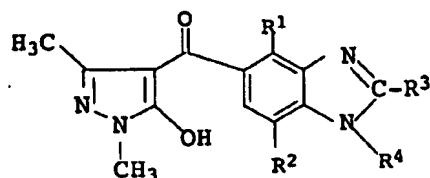


30

Verbindungen der allgemeinen Formel I-3l, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle B entsprechen.

35 - Tabelle 51: Verbindungen I-3m.1 bis I-3m.1363

40



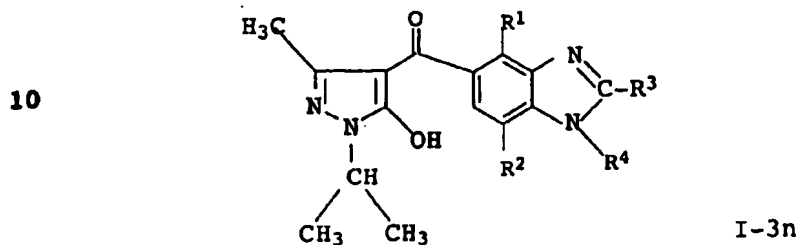
I-3m

45

117

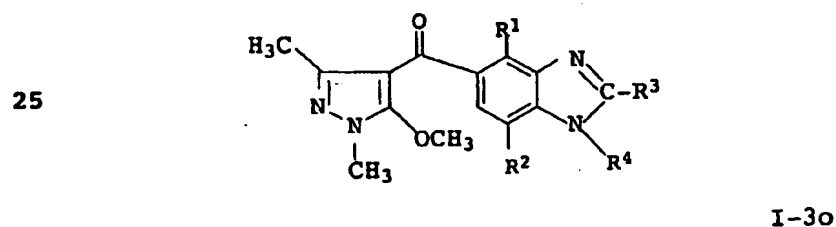
Verbindungen der allgemeinen Formel I-3m, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle B entsprechen.

5 - Tabelle 52: Verbindungen I-3n.1 bis I-3n.1363



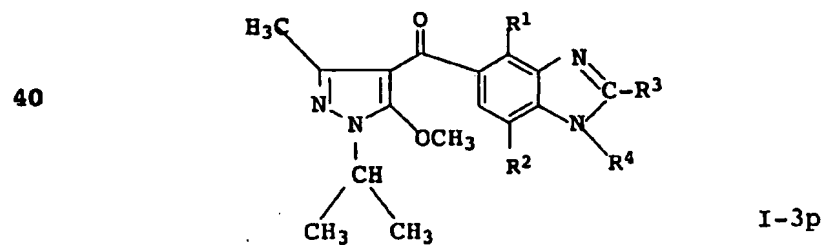
15 Verbindungen der allgemeinen Formel I-3n, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle B entsprechen.

20 - Tabelle 53: Verbindungen I-3o.1 bis I-3o.1363



30 Verbindungen der allgemeinen Formel I-3p, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle B entsprechen.

35 - Tabelle 54: Verbindungen I-3p.1 bis I-3p.1363



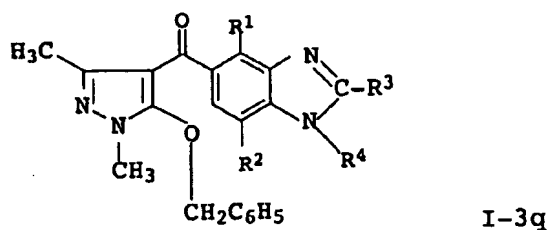
45

118

Verbindungen der allgemeinen Formel I-3p, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle B entsprechen.

5 - Tabelle 55: Verbindungen I-3q.1 bis I-3q.1363

10

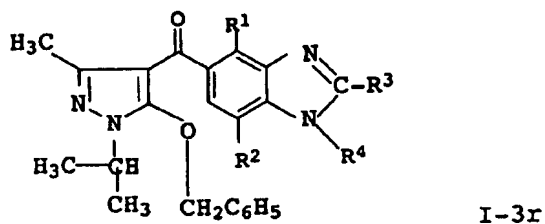


15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-3g, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle B entsprechen.

20 - Tabelle 56: Verbindungen I-3r.1 bis I-3r.1363

25

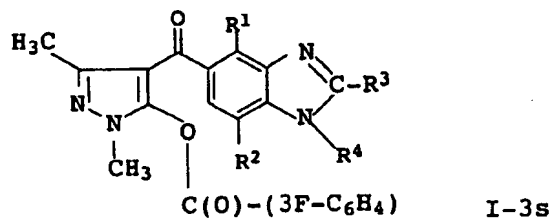


30

Verbindungen der allgemeinen Formel I-3r, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle B entsprechen.

35 - Tabelle 57: Verbindungen I-3s.1 bis I-3s.1363

40



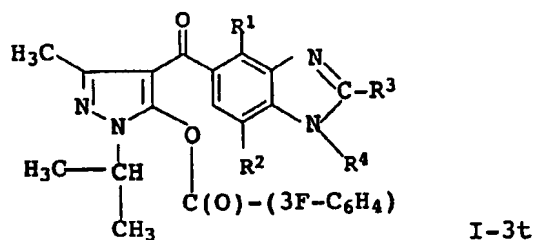
45

119

Verbindungen der allgemeinen Formel I-3s, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle B entsprechen.

5 - Tabelle 58: Verbindungen I-3t.1 bis I-3t.1363

10



15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-3t, in der die Substituenten R^1 , R^2 , R^3 und R^4 für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle B entsprechen.

20

Tabelle C

	R^1	R^2	X	Y
1	H	H	N	S
2	CH ₃	H	N	S
25 3	Cl	H	N	S
4	OCH ₃	H	N	S
5	SCH ₃	H	N	S
6	S(O) ₂ CH ₃	H	N	S
30 7	H	Cl	N	S
8	CH ₃	Cl	N	S
9	Cl	Cl	N	S
10	OCH ₃	Cl	N	S
35 11	SCH ₃	Cl	N	S
12	S(O) ₂ CH ₃	Cl	N	S
13	H	CH ₃	N	S
14	CH ₃	CH ₃	N	S
15	Cl	CH ₃	N	S
40 16	OCH ₃	CH ₃	N	S
17	SCH ₃	CH ₃	N	S
18	S(O) ₂ CH ₃	CH ₃	N	S
19	H	H	N	NH
45 20	CH ₃	H	N	NH
21	Cl	H	N	NH

120

	R ¹	R ²	X	Y	
5	22	OCH ₃	H	N	NH
	23	SCH ₃	H	N	NH
	24	S(O) ₂ CH ₃	H	N	NH
	25	H	Cl	N	NH
	26	CH ₃	Cl	N	NH
10	27	Cl	Cl	N	NH
	28	OCH ₃	Cl	N	NH
	29	SCH ₃	Cl	N	NH
	30	S(O) ₂ CH ₃	Cl	N	NH
	31	H	CH ₃	N	NH
15	32	CH ₃	CH ₃	N	NH
	33	Cl	CH ₃	N	NH
	34	OCH ₃	CH ₃	N	NH
	35	SCH ₃	CH ₃	N	NH
	36	S(O) ₂ CH ₃	CH ₃	N	NH
20	37	H	H	N	NCH ₃
	38	CH ₃	H	N	NCH ₃
	39	Cl	H	N	NCH ₃
	40	OCH ₃	H	N	NCH ₃
	41	SCH ₃	H	N	NCH ₃
25	42	S(O) ₂ CH ₃	H	N	NCH ₃
	43	H	Cl	N	NCH ₃
	44	CH ₃	Cl	N	NCH ₃
	45	Cl	Cl	N	NCH ₃
	46	OCH ₃	Cl	N	NCH ₃
30	47	SCH ₃	Cl	N	NCH ₃
	48	S(O) ₂ CH ₃	Cl	N	NCH ₃
	49	H	CH ₃	N	NCH ₃
	50	CH ₃	CH ₃	N	NCH ₃
	51	Cl	CH ₃	N	NCH ₃
35	52	OCH ₃	CH ₃	N	NCH ₃
	53	SCH ₃	CH ₃	N	NCH ₃
	54	S(O) ₂ CH ₃	CH ₃	N	NCH ₃
	55	H	H	N	NC ₂ H ₅
	56	CH ₃	H	N	NC ₂ H ₅
40	57	Cl	H	N	NC ₂ H ₅
	58	OCH ₃	H	N	NC ₂ H ₅
	59	SCH ₃	H	N	NC ₂ H ₅
	60	S(O) ₂ CH ₃	H	N	NC ₂ H ₅

121

	R ¹	R ²	X	Y	
5	61	H	Cl	N	NC ₂ H ₅
	62	CH ₃	Cl	N	NC ₂ H ₅
	63	Cl	Cl	N	NC ₂ H ₅
	64	OCH ₃	Cl	N	NC ₂ H ₅
	65	SCH ₃	Cl	N	NC ₂ H ₅
10	66	S(O) ₂ CH ₃	Cl	N	NC ₂ H ₅
	67	H	CH ₃	N	NC ₂ H ₅
	68	CH ₃	CH ₃	N	NC ₂ H ₅
	69	Cl	CH ₃	N	NC ₂ H ₅
	70	OCH ₃	CH ₃	N	NC ₂ H ₅
15	71	SCH ₃	CH ₃	N	NC ₂ H ₅
	72	S(O) ₂ CH ₃	CH ₃	N	NC ₂ H ₅
	73	H	H	N	N-i-C ₃ H ₇
	74	CH ₃	H	N	N-i-C ₃ H ₇
	75	Cl	H	N	N-i-C ₃ H ₇
20	76	OCH ₃	H	N	N-i-C ₃ H ₇
	77	SCH ₃	H	N	N-i-C ₃ H ₇
	78	S(O) ₂ CH ₃	H	N	N-i-C ₃ H ₇
	79	H	Cl	N	N-i-C ₃ H ₇
	80	CH ₃	Cl	N	N-i-C ₃ H ₇
25	81	Cl	Cl	N	N-i-C ₃ H ₇
	82	OCH ₃	Cl	N	N-i-C ₃ H ₇
	83	SCH ₃	Cl	N	N-i-C ₃ H ₇
	84	S(O) ₂ CH ₃	Cl	N	N-i-C ₃ H ₇
	85	H	CH ₃	N	N-i-C ₃ H ₇
30	86	CH ₃	CH ₃	N	N-i-C ₃ H ₇
	87	Cl	CH ₃	N	N-i-C ₃ H ₇
	88	OCH ₃	CH ₃	N	N-i-C ₃ H ₇
	89	SCH ₃	CH ₃	N	N-i-C ₃ H ₇
	90	S(O) ₂ CH ₃	CH ₃	N	N-i-C ₃ H ₇

40

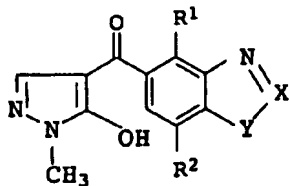
45

122

Weitere Beispiele für erfindungsgemäße bevorzugte Benzthiadiazol-5-ylcarbonyl-Derivate von Pyrazolen ($X = N$, $Y = S$) und Benzotriazol-5-ylcarbonyl-Derivate von Pyrazolen ($X = N$, $Y = N-R^4$) sind die in den Tabellen 59 bis 77 genannten Verbindungen (Verbindungen I-4).

- Tabelle 59: Verbindungen I-4a.1 bis I-4a.90

10



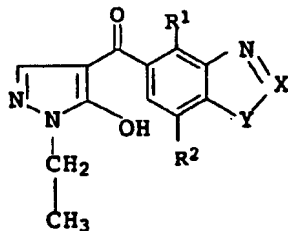
15

I-4a

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4a, in der die Substituenten R^1 , R^2 , X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle C entsprechen.

- Tabelle 60: Verbindungen I-4b.1 bis I-4b.90

25



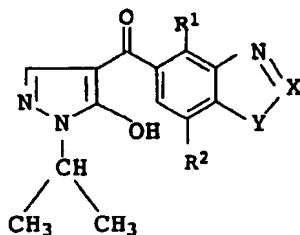
30

I-4b

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4b, in der die Substituenten R^1 , R^2 , X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle C entsprechen.

- Tabelle 61: Verbindungen I-4c.1 bis I-4c.90

40



45

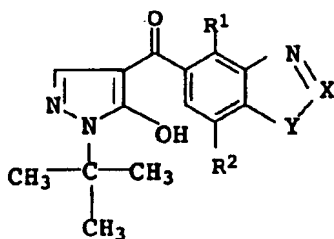
I-4c

123

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4c, in der die Substituenten R¹, R², X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle C entsprechen.

5 - Tabelle 62: Verbindungen I-3d.1 bis I-3d.1363

10



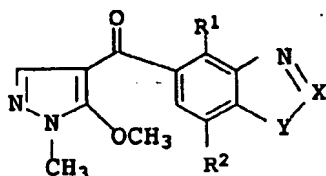
I-4d

15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4d, in der die Substituenten R¹, R², X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle C entsprechen.

20 - Tabelle 63: Verbindungen I-4e.1 bis I-4e.90

25



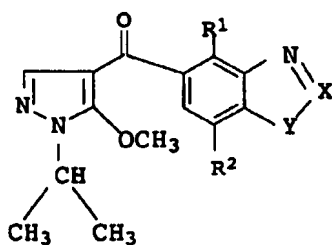
I-4e

30

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4e, in der die Substituenten R¹, R², X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle C entsprechen.

35 - Tabelle 64: Verbindungen I-4f.1 bis I-4f.90

40



I-4f

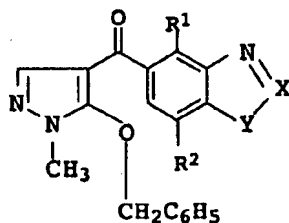
45

124

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4f, in der die Substituenten R^1 , R^2 , X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle C entsprechen.

5 - Tabelle 65: Verbindungen I-4g.1 bis I-4g.90

10



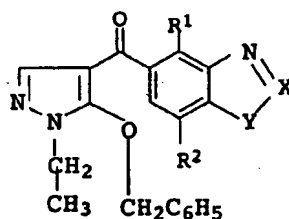
I-4g

15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4g, in der die Substituenten R^1 , R^2 , X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle C entsprechen.

20 - Tabelle 66: Verbindungen I-4h.1 bis I-4h.90

25



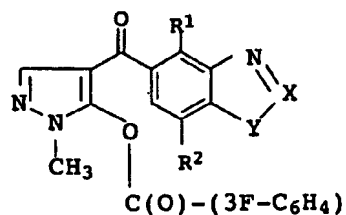
I-4h

30

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4h, in der die Substituenten R^1 , R^2 , X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle C entsprechen.

35 - Tabelle 67: Verbindungen I-4i.1 bis I-4i.90

40



I-4i

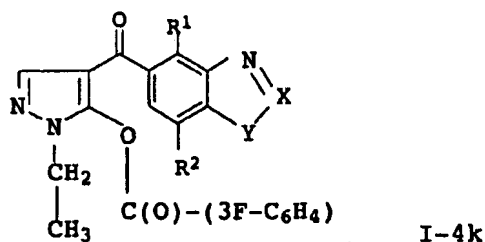
45

125

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4i, in der die Substituenten R^1 , R^2 , X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle C entsprechen.

5 - Tabelle 68: Verbindungen I-4k.1 bis I-4k.90

10

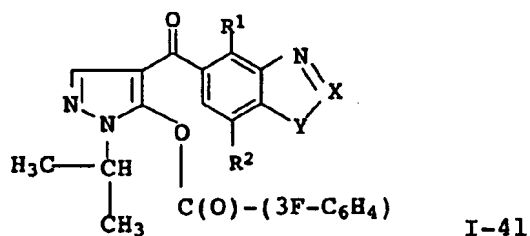


15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4k, in der die Substituenten R^1 , R^2 , X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle C entsprechen.

20 - Tabelle 69: Verbindungen I-4l.1 bis I-4l.90

25

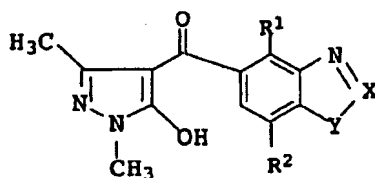


30

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4l, in der die Substituenten R^1 , R^2 , X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle C entsprechen.

35 - Tabelle 70: Verbindungen I-4m.1 bis I-4m.90

40



I-4m

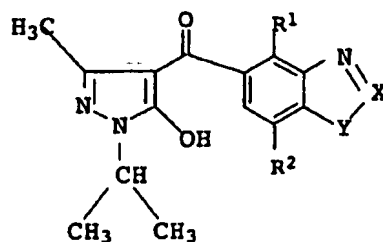
45

126

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4m, in der die Substituenten R^1 , R^2 , X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle C entsprechen.

5 - Tabelle 71: Verbindungen I-4n.1 bis I-4n.90

10



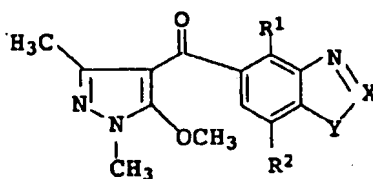
I-4n

15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4n, in der die Substituenten R^1 , R^2 , X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle C entsprechen.

20 - Tabelle 72: Verbindungen I-4o.1 bis I-4o.90

25



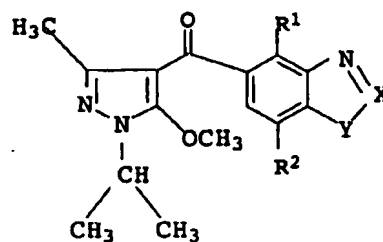
I-4o

30

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4o, in der die Substituenten R^1 , R^2 , X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle C entsprechen.

35 - Tabelle 73: Verbindungen I-4p.1 bis I-4p.90

40



I-4p

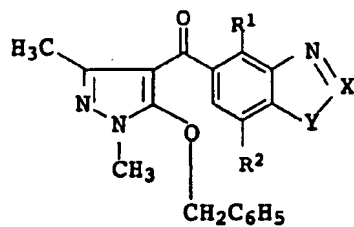
45

127

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4p, in der die Substituenten R^1 , R^2 , X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle C entsprechen.

5 - Tabelle 74: Verbindungen I-4q.1 bis I-4q.90

10



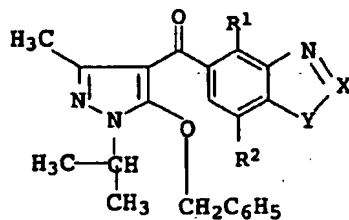
I-4q

15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4q, in der die Substituenten R^1 , R^2 , X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle C entsprechen.

20 - Tabelle 75: Verbindungen I-4r.1 bis I-4r.90

25



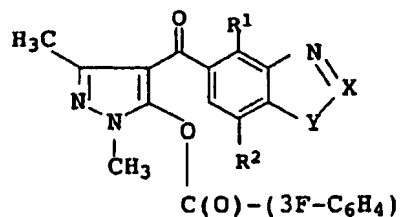
I-4r

30

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4r, in der die Substituenten R^1 , R^2 , X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle B entsprechen.

35 - Tabelle 76: Verbindungen I-4s.1 bis I-4s.90

40



I-4s

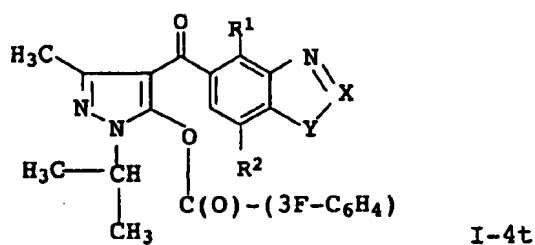
45

128

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4s, in der die Substituenten R^1 , R^2 , X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle C entsprechen.

5 - Tabelle 77: Verbindungen I-4t.1 bis I-4t.90

10



15

Verbindungen der allgemeinen Formel I-4t, in der die Substituenten R^1 , R^2 , X und Y für jede einzelne Verbindung jeweils einer Zeile der Tabelle C entsprechen.

20 Die Darstellung von Verbindungen der Formel I, worin R^8 für Hydroxy steht, erfolgt durch Umsetzung einer aktivierten Carbonsäure IVb oder einer Carbonsäure IVa, die vorzugsweise in situ aktiviert wird, mit 5-Hydroxypyrazol der Formel III zu dem Acylierungsprodukt und anschließende Umlagerung.

25

30

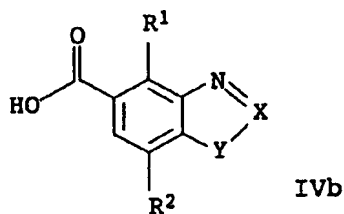
35

40

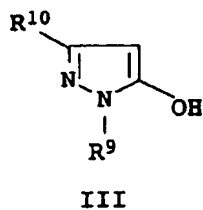
45

129

5

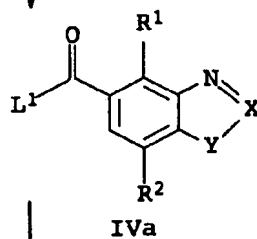


10

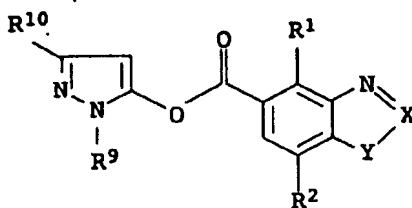


15

+

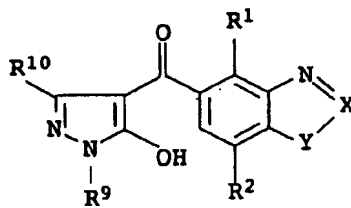


20



25

30



35

I (mit R⁸ = OH)

40

L¹ steht für eine nucleophil verdrängbare Abgangsgruppe, wie Halogenen z.B. Brom oder Chlor, Hetaryl, z.B. Imidazolyl oder Pyridyl, Carboxylat, z.B. Acetat oder Trifluoracetat etc.

45

130

Die aktivierte Carbonsäure IVa kann direkt eingesetzt werden, wie im Fall der Benzoylhalogenide oder in situ erzeugt werden, z.B. mit einem Carbodiimid wie Ethyl-(3'-dimethylaminopropyl)carbodiimid, Dicyclohexylcarbodiimid, Triphenylphosphin/Azodicarbonsäure-
5 ester, 2-Pyridindisulfid/Triphenylphosphin, Carbonyldiimidazol etc.

Gegebenenfalls kann es von Vorteil sein, die Acylierungsreaktion in Gegenwart einer Base auszuführen. Die Reaktanden und die
10 Hilfsbase werden dabei zweckmäßigerweise in äquimolaren Mengen eingesetzt. Ein geringer Überschuß der Hilfsbase z.B. 1,2 bis 1,5 Moläquivalente, bezogen auf IVa bzw. IVb, kann unter Umständen vorteilhaft sein.

15 Als Hilfsbasen eignen sich tertiäre Alkylamine, Pyridin 4-Dimethylaminopyridin oder Alkalimetallcarbonate. Als Lösungsmittel können z.B. chlorierte Kohlenwasserstoffe, wie Methylenchlorid oder 1,2-Dichlorethan, aromatische Kohlenwasserstoffe, wie Toluol, Xylol oder Chlorbenzol, Ether, wie Diethylether, Methyl-
20 tert.-butylether, Tetrahydrofuran oder Dioxan, polare aprotische Lösungsmittel, wie Acetonitril, Dimethylformamid oder Dimethylsulfoxid oder Ester wie Essigsäureethylester oder Gemische hiervon verwendet werden.

25 Werden Halogenide als aktivierte Carbonsäurekomponente eingesetzt, so kann es zweckmäßig sein, bei Zugabe dieses Reaktionspartners die Reaktionsmischung auf 0 bis 10°C abzukühlen. Anschließend rührt man bei 20 bis 100°C, vorzugsweise bei 25 bis 50°C, bis die Umsetzung vollständig ist. Die Aufarbeitung erfolgt
30 in üblicher Weise, z.B. wird das Reaktionsgemisch auf Wasser gegossen, das Wertprodukt extrahiert. Als Lösungsmittel eignen sich hierfür besonders Methylenchlorid, Diethylether und Essigsäureethylester. Nach Trocknen der organischen Phase und Entfernen des Lösungsmittels kann der rohe Ester ohne weitere Reinigung zur Um-
35 lagerung eingesetzt werden.

Die Umlagerung der Ester zu den Verbindungen der Formel I erfolgt zweckmäßigerweise bei Temperaturen von 20 bis 100°C in einem Lösungsmittel und in Gegenwart einer Base sowie gegebenenfalls
40 mit Hilfe einer Cyanoverbindung als Katalysator.

Als Lösungsmittel können z.B. Acetonitril, Methylenchlorid, 1,2-Dichlorethan, Dioxan, Essigsäureethylester, Toluol oder Gemische hiervon verwendet werden. Bevorzugte Lösungsmittel sind
45 Acetonitril und Dioxan.

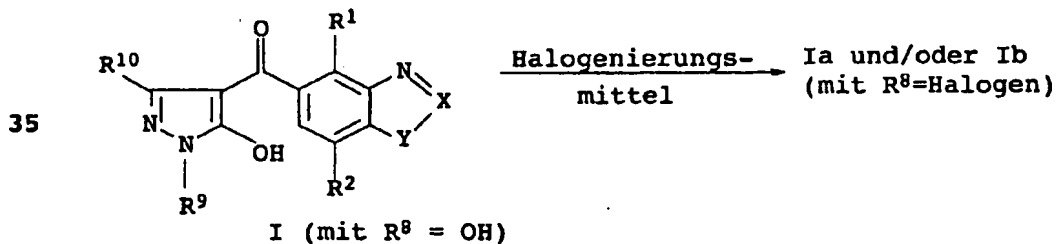
131

Geeignete Basen sind tertiäre Amine wie Triethylamin, aromatische Amine wie Pyridin oder Alkalicarbonate, wie Natriumcarbonat oder Kaliumcarbonat, die vorzugsweise in äquimolarer Menge oder bis zu einem vierfachen Überschuß, bezogen auf den Ester, eingesetzt werden. Bevorzugt werden Triethylamin oder Alkalicarbonat verwendet, vorzugsweise in doppelt äquimolaren Verhältnis in Bezug auf den Ester.

Als Cyanoverbindungen kommen anorganische Cyanide, wie Natriumcyanid oder Kaliumcyanid und organische Cyanoverbindungen, wie Acetoncyanhydrin oder Trimethylsilylcyanid in Betracht. Sie werden in einer Menge von 1 bis 50 Molprozent, bezogen auf den Ester, eingesetzt. Vorzugsweise werden Acetoncyanhydrin oder Trimethylsilylcyanid, z.B. in einer Menge von 5 bis 15, vorzugsweise etwa 10 Molprozent, bezogen auf den Ester, eingesetzt.

Die Aufarbeitung kann in an sich bekannter Weise erfolgen. Das Reaktionsgemisch wird z.B. mit verdünnter Mineralsäure, wie 5 %ige Salzsäure oder Schwefelsäure, angesäuert, mit einem organischen Lösungsmittel, z.B. Methylenchlorid oder Essigsäureethylester extrahiert. Der organische Extrakt kann mit 5-10%iger Alkalicarbonatlösung, z.B. Natriumcarbonat- oder Kaliumcarbonatlösung extrahiert werden. Die wäßrige Phase wird angesäuert und der sich bildende Niederschlag abgesaugt und/oder mit Methylenchlorid oder Essigsäureethylester extrahiert, getrocknet und eingeeengt.

B. Die Darstellung von Verbindungen der Formel I mit $R^8 = \text{Halogen}$ erfolgt durch Umsetzung von Pyrazol-Derivaten der Formel I (mit $R^8 = \text{Hydroxy}$) mit Halogenierungsmitteln:



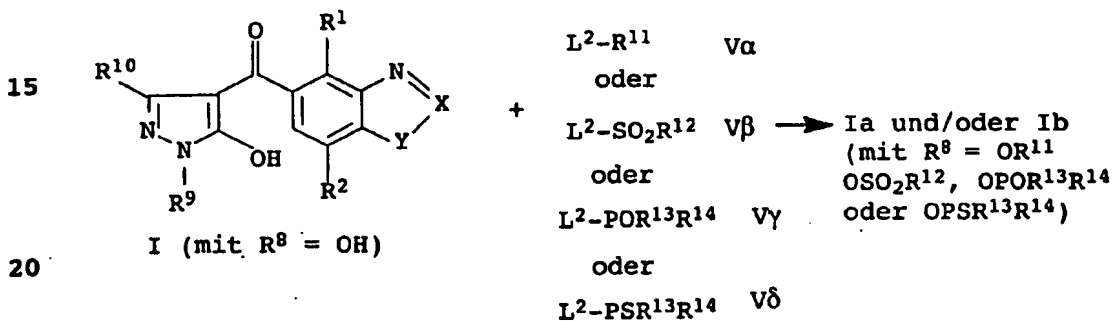
40 Hier und im folgenden steht "Verbindung Ia" für eine Verbindung der allgemeinen Formel I, worin Pz für einen Pyrazolylrest der allgemeinen Formel IIa steht und Verbindung Ib entsprechend für eine Verbindung der allgemeinen Formel I, worin Pz für einen Rest IIb steht.

45

132

Als Halogenierungsmittel eignen sich beispielsweise Phosgen, Diphosgen, Triphosgen, Thionylchlorid, Oxalylchlorid, Phosphoroxychlorid, Phosphorpentachlorid, Mesylchlorid, Chlormethylen-N,N-dimethylammoniumchlorid, Oxalylbromid, Phosphoroxybromid etc.

- C. Die Darstellung von Verbindungen der Formel I mit $R^8 = OR^{11}$, OSO_2R^{12} , $OPOR^{13}R^{14}$ oder $OPSR^{13}R^{14}$ durch Umsetzung von Pyrazol-Derivaten der Formel I (mit $R^8 = \text{Hydroxy}$) mit Alkylierungs-, Sulfonylierungs- bzw. Phosphonylierungsmitteln Va, V β , V γ beziehungsweise V δ .



- 25 L^2 steht für eine nucleophil verdrängbare Abgangsgruppe, wie Halogen, z.B. Chlor oder Brom, Hetaryl, z.B. Imidazolyl, Carboxylat, z.B. Acetat, oder Sulfonat, z.B. Mesylat oder Triflat etc.

- 30 Bei der Herstellung von Verbindungen der Formel I mit $R^8 = OR^{11}$ aus Verbindungen der Formel I mit $R^8 = OH$ arbeitet man vorzugsweise in Gegenwart einer Base.

- 35 Die Reaktanden und die Base werden dabei zweckmäßigerweise in äquimolaren Mengen eingesetzt. Ein geringer Überschuß der Base, z.B. 1,1 - 1,5 Moläquivalente, bezogen auf I kann unter Umständen vorteilhaft sein.

- 40 Als Basen eignen sich tertiäre Amine, Pyridine, Alkalimetallcarbonate oder Alkalimetallhydride. Als Lösungsmittel eignen sich z.B. chlorierte Kohlenwasserstoffe wie Methylenchlorid oder 1,2-Dichlorethan, aromatische Kohlenwasserstoffe wie Toluol, Xylol oder Chlorbenzol, Ether wie Diethylether, Methyl-tert-butylether, Tetrahydrofuran, Dioxan oder Dimethoxyethan, polare aprotische Lösungsmittel wie Acetonitril, Dimethylformamid oder Dimethylsulfoxid oder Ester wie Essigsäureethylester und Gemische hiervon.
- 45

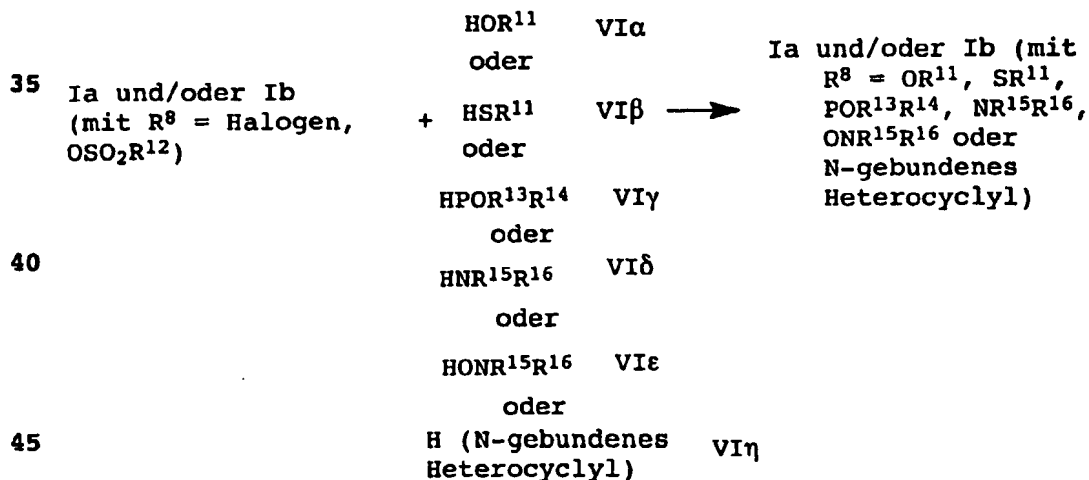
133

Werden anstelle des Alkohols I ($R^8 = OH$) Halogenide ($R^8 = \text{Halogen}$) oder aktivierte Alkohole wie Mesylate oder Tosylate ($R^8 = \text{OSO}_2\text{CH}_3$ oder $\text{OSO}_2\text{-Tolyl}$) zur Derivatisierung eingesetzt, so kann es zweckmäßig sein, bei Zugabe des Reaktionspartners die Reaktionsmischung auf 0 bis 10°C abzukühlen. Anschließend rührt man bei 20 bis 100°C , vorzugsweise bei 20 bis 75°C bis die Umsetzung vollständig ist.

Die Aufarbeitung erfolgt in üblicher Weise, z.B. wird das Reaktionsgemisch auf Wasser gegossen, das Wertprodukt extrahiert. Als Lösungsmittel eignen sich hierfür besonders Lösungsmittel wie Methylenchlorid, Essigsäureethylester, Methyl-tert-butylether oder Diethylether. Nach Trocknen der organischen Phase und Entfernen des Lösungsmittel kann das Rohprodukt gegebenenfalls noch durch Säulenchromatographie an Kieselgel gereinigt werden. Als Eluenten eignen sich Lösungsmittel wie Methylenchlorid, Essigsäureethylester, Cyclohexan, Petrolether, Methanol, Aceton oder Chloroform und Gemische hiervon.

Die Verbindungen der Formel Va , $\text{V}\beta$, $\text{V}\gamma$ oder $\text{V}\delta$ können direkt eingesetzt werden wie z.B. im Fall der Carbonsäurehalogenide oder in situ erzeugt werden, z.B. aktivierte Carbonsäuren (mit Carbonsäure und Dicyclohexylcarbodiimid etc.).

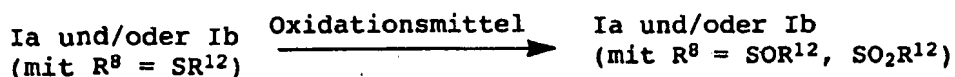
D. Die Darstellung von Verbindungen der Formel I mit $R^8 = \text{OR}^{11}$, SR^{11} , $\text{POR}^{13}\text{R}^{14}$, $\text{NR}^{15}\text{R}^{16}$, $\text{ONR}^{15}\text{R}^{16}$ oder N-gebundenes Heterocyclyl erfolgt durch Umsetzung von Verbindungen der Formel I mit $R^8 = \text{Halogen}$, $\text{OSO}_2\text{R}^{12}$ mit Verbindungen der Formel $\text{VI}\alpha$, $\text{VI}\beta$, $\text{VI}\gamma$, $\text{VI}\delta$, $\text{VI}\epsilon$ oder $\text{VI}\eta$, gegebenenfalls in Gegenwart einer Base oder unter vorangehender Salzbildung.



134

- E. Die Darstellung von Verbindungen der Formel I mit $R^8 = \text{SOR}^{12}$, SO_2R^{12} erfolgt beispielsweise durch Umsetzung von Verbindungen der Formel I mit $R^8 = \text{SR}^{12}$ mit einem Oxidationsmittel.

5



- 10 Als Oxidationsmittel kommen beispielsweise m-Chlorperbenzoesäure, Peroxyessigsäure, Trifluorperoxyessigsäure, Wasserstoffperoxid, ggf. in Gegenwart eines Katalysators wie Wolframat, in Betracht.

- 15 Für die unter den Punkten B bis E genannten Reaktionen gelten folgende Bedingungen:

Die Ausgangsverbindungen werden in der Regel im äquimolaren Verhältnis eingesetzt. Es kann aber auch von Vorteil sein, die

- 20 eine oder andere Komponente im Überschuß einzusetzen.

Gegebenenfalls kann es von Vorteil sein, die Umsetzungen in Gegenwart einer Base durchzuführen. Die Reaktanden und die Base werden dabei zweckmäßigerweise in äquimolaren Mengen eingesetzt.

25

Im Hinblick auf die Verfahren C und D kann es unter Umständen vorteilhaft sein, ein Überschuß der Base z.B. 1,5 bis 3 Moläquivalente jeweils bezogen auf das Edukt einzusetzen.

- 30 Als Basen eignen sich tertiäre Alkylamine, wie Triethylamin, aromatische Amine, wie Pyridin, Alkalimetallcarbonate, z.B. Natriumcarbonat oder Kaliumcarbonat, Alkalimetallhydrogencarbonate, wie Natriumhydrogencarbonat und Kaliumhydrogencarbonat, Alkalimetallalkoholate wie Natriummethanolat, Natriumethanolat, Kalium-tert.-butanolat oder Alkalimetallhydride, z.B. Natriumhydrid. Bevorzugt
- 35 verwendet werden Triethylamin oder Pyridin.

Als Lösungsmittel kommen z.B. chlorierte Kohlenwasserstoffe, wie Methylenchlorid oder 1,2-Dichlorethan, aromatische Kohlenwasserstoffe, z.B. Toluol, Xylol oder Chlorbenzol, Ether, wie Diethylether, Methyl-tert.-butylether, Tetrahydrofuran oder Dioxan, polare aprotische Lösungsmittel, wie Acetonitril, Dimethylformamid oder Dimethylsulfoxid oder Ester, wie Essigsäureethylester, oder Gemische hiervon in Betracht.

45

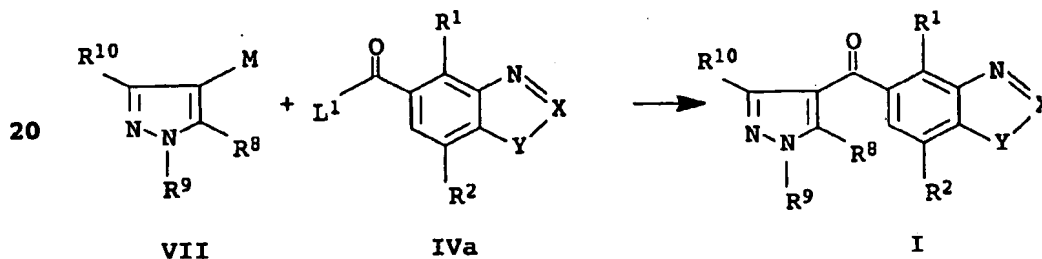
135

In der Regel liegt die Reaktionstemperatur im Bereich von 0°C bis zur Höhe des Siedepunktes des Reaktionsgemisches.

Die Aufarbeitung kann in an sich bekannter Weise zum Produkt hin 5 erfolgen.

In Abhängigkeit von den Reaktionsbedingungen können bei den Verfahren B bis D die Verbindungen Ia, Ib oder Gemische hiervon gebildet werden. Letztere können durch klassische Trennmethode-
10 wie z.B. Kristallisation, Chromatographie etc., getrennt werden.

F. Die Darstellung von Verbindungen der Formel I, worin Pz für eine Gruppe der allgemeinen Formel IIa steht, kann auch durch Umsetzung eines metallierten Pyrazol-Derivats der Formel VII
15 mit einem Carbonsäure-Derivat der Formel IVa erfolgen:



25 M steht hierbei für ein Metall, insbesondere für ein Alkalimetall wie Lithium oder Natrium, ein Erdalkalimetall wie z.B. Magnesium oder ein Übergangsmetall wie Palladium, Nickel etc. und L¹ für eine nukleophil verdrängbare Abgangsgruppe wie Halogen, z.B. Chlor oder Brom, Alkylsulfonat wie Mesylat, Halogenalkylsulfonat
30 wie Triflat oder Cyanid. R⁸ weist vorzugsweise keine aziden Wasserstoffatome auf.

Die Umsetzung wird in der Regel bei Temperaturen von -100°C bis Rückflußtemperatur des Reaktionsgemisches durchgeführt. Als
35 Lösungsmittel eignen sich inerte aprotische Lösungsmittel, wie Ether, z.B. Diethylether, Tetrahydrofuran. Die Verbindungen der Formel IVa werden in der Regel im Überschuß eingesetzt, es kann aber auch von Vorteil sein, diese in äquimolaren Mengen oder im Unterschluß einzusetzen. Die Aufarbeitung erfolgt zum Produkt hin.

40

Die metallierten Pyrazol-Derivate der Formel VII können auf an sich bekannte Art und Weise durch Umsetzung von in 4-Position halogenierten Pyrazolen mit Metallen wie Lithium, Natrium, Magnesium etc. oder mit metallorganischen Verbindungen wie z.B. Butyl-
45 lithium gebildet werden. Es ist aber auch möglich Pyrazole, die in 4-Position mit Wasserstoff verknüpft sind, direkt zu metallieren, z.B. mit den voranstehend genannten Metallen bzw. metall-

136

organischen Verbindungen. Die Umsetzungen werden in der Regel in einem inerten aprotischen Lösungsmittel durchgeführt, bevorzugt in Ether wie Diethylether, Tetrahydrofuran etc.. Die Reaktionstemperatur liegt im Bereich von -100°C bis zur Höhe des Siedepunktes des Reaktionsgemisches. Die Verbindungen der Formel VII werden vorzugsweise in situ erzeugt und direkt umgesetzt.

Die als Ausgangsmaterialien verwendeten 5-Hydroxypyrazole der Formel III sind bekannt oder können an sich nach bekannten Verfahren hergestellt werden, wie sie beispielsweise in der EP-A 240 001, in J. Chem. Soc. 315, S.383 (1997), J. Prakt. Chem. 315, S. 382 (1973) beschrieben sind (siehe auch Übersichten in Advances Heterocycle. Chem. 48, S. 223-299 (1990) und Katritzky, Rees (Hrsg.), Comprehensive Heterocyclic Chem. Vol. 5, Pergamon Press 1984, Oxford, S. 167-343 und dort zitierte Literatur). 1,3-Dimethyl-5-hydroxypyrazol ist überdies eine käufliche Verbindung.

Die Alkylierungsmittel Va, Sulfonylierungsmittel Vß, Phosphonylierungsmittel Vy beziehungsweise Vð, sowie die Verbindungen VIa, VIß, VIγ, VIð und VIë sind ebenfalls bekannt oder können nach bekannten Verfahren hergestellt werden.

Die Carbonsäuren der allgemeinen Formel IVa beziehungsweise ihre aktivierten Derivate IVb sind entweder aus der Literatur bekannt oder lassen sich in Analogie zu bekannten Verfahren herstellen.

In Schema 1 ist ein üblicher Zugang zu Benzothiazol-5-carbonsäuren (Verbindungen IV-1) dargestellt.

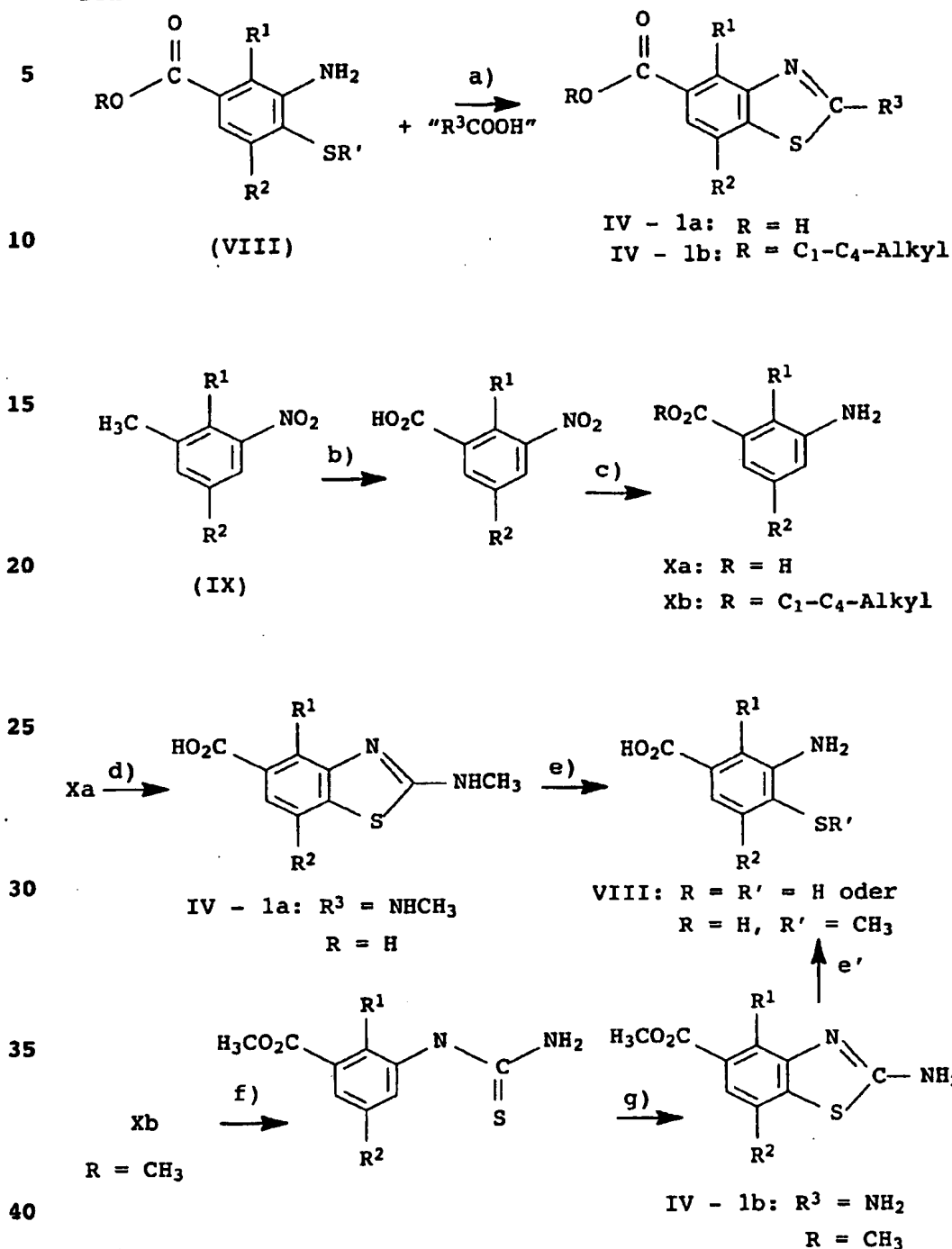
30

35

40

45

Schema 1



In der Formel IV-1 steht R für Wasserstoff (Verbindung IV-1a) oder einen verseifbaren Kohlenwasserstoffrest, z.B. für Methyl (Verbindung IV-1b). Verbindungen der allgemeinen Formel IV-1 lassen sich beispielsweise gemäß Reaktionsschritt a) durch Kondensation von ortho-Aminothiophenolen der allgemeinen Formel VIII

(R' = H) oder von ortho-Aminothioethern der allgemeinen Formel VIII (R' = C₁-C₄-Alkyl, z.B. Methyl) mit einem Carbonsäureäquivalent "R³-CO₂H" also einer Carbonsäure R³CO₂H oder aktivierten Derivaten R³COL¹, R³C(L³); davon, worin L¹ für eine reaktive Abgangsgruppe steht und L³ für eine C₁-C₄-Alkoxygruppe steht, herstellen. Beispiele für L¹ sind Chlor, Brom, Carboxylat, wie Acetat, Trifluoracetat, N-Heterocyclyl, wie Imidazolyl, Pyridyl etc. Beispiele für R³COL¹ und R³C(L³); sind die Säurehalogenide, Carbonsäureester und Carbonsäureanhydride sowie die Orthoester der Carbonsäuren R³CO₂H.

Die Kondensationsreaktion a) erfolgt vorzugsweise unter neutralen bis sauren Reaktionsbedingungen, vorzugsweise in Gegenwart einer anorganischen oder organischen Säure, wie beispielsweise Salzsäure, Schwefelsäure, p-Toluolsulfonsäure und Pyridinium-p-toluolsulfonat in einem organischen Lösungsmittel bei Temperaturen im Bereich von 0 bis 150°C und vorzugsweise im Bereich von 20 bis 120°C. Als Lösungsmittel kommen insbesondere gesättigte Kohlenwasserstoffe, halogenierte Kohlenwasserstoffe, aromatische Kohlenwasserstoffe wie Benzol, aliphatische Ether wie Diethylether und tert-Butyl-methylether oder Pyridin in Betracht. Zur Herstellung von Bezothiazolen aus o-Aminothiophenolen beziehungsweise entsprechenden Thiomethylethern siehe auch Houben-Weyl, Methoden der Organischen Chemie, Bd. E 8b, S.869-871.

Schritt a) kann auch zweistufig durchgeführt werden, wobei zunächst die Aminofunktion in VIII mit einer Carbonsäure R⁹-COOH oder einem Derivat davon zum Carbonsäureamid umgesetzt wird, das anschließend zum Benzothiazol der allgemeinen Formel IV-1 cyclisiert wird.

Die Umsetzung zum Amid gelingt unter den für die Amidbildung üblichen Bedingungen, beispielsweise durch Umsetzung einer Säure in Gegenwart eines wasserbindenden Mittels. Die Cyclisierung gelingt mit Lewissäuren oder Phosgen. Die Cyclisierung wird dann vorzugsweise in einem inerten organischen Lösungsmittel, beispielsweise einem aliphatischen oder aromatischen Kohlenwasserstoff oder in einem Halogenkohlenwasserstoff durchgeführt.

Ortho-Aminothiophenole der allgemeinen Formel VIII (R' = H) können gemäß Schema 1 ausgehend von 3-Nitrotoluolen der allgemeinen Formel IX hergestellt werden. Hierin kann die Methylgruppe in bekannter Weise katalytisch oder stöchiometrisch zur Carbonsäure oxidiert werden (Schritt b). Als Oxidationsmittel können beispielsweise Metalloxide von Übergangsmetallen, beispielsweise Mangandioxid, Chromtrioxid sowie deren anionische Komplexsalze, z.B. Natriumdichromat oder Chromylchlorid, Pyridiniumchromat,

139

- weiterhin oxidierende Säuren, beispielsweise HNO_3 , oxidierende Gase wie Sauerstoff oder Chlor, gegebenenfalls in Anwesenheit von Übergangsmetallen (beziehungsweise der Salze, z.B. der Oxide oder Chloride) als Katalysatoren eingesetzt werden. Je nach Löslichkeit der zu oxidierenden Verbindung und abhängig von dem verwendeten Oxidationsmittel arbeitet man vorzugsweise in wässrigen Lösungen, einphasigen Systemen aus Wasser und mit Wasser mischbaren organischen Lösungsmitteln oder in mehrphasigen Systemen aus Wasser und organischen Lösungsmitteln unter Phasentransferkatalyse.
- 10 Abhängig vom gewählten Oxidationsmittel wird man die Oxidation in der Regel bei Temperaturen im Bereich von -15 bis $+150^\circ\text{C}$ und vorzugsweise im Bereich von 0 bis 100°C durchführen. Zur Oxidation von aromatischen Methylgruppen zu Benzoesäuren siehe beispielsweise (Houben-Weyl: "Methoden der organischen Chemie", V. Band, 15 IV/1a 1981; Bd. VIII 1952; E. Bengtsson, Acta Chem. Scand. 1953, 7, 774; Singer et al. Org. Synth. Coll. Vol III, 1955, 740; B.A.S. Hay et al. Can. J. Chem. 1965, 43, 1306)

- Die so erhaltenen 3-Nitro-benzoesäurederivate werden anschließend
- 20 in Schritt c) zu den 3-Aminobenzoesäuren reduziert. Die selektive Reduktion von aromatischen Nitrogruppen in Anwesenheit von Carbonsäuregruppen ist grundsätzlich bekannt. Als Reduktionsmittel kommen beispielsweise Hydrazine, Metallhydride wie Aluminiumhydrid, und davon abgeleitete Komplexverbindungen wie Lithiumaluminiumhydrid, Diisobutylaluminiumhydrid, oder Borane in Betracht.
- 25 Bevorzugtes Reduktionsmittel ist Wasserstoff in Gegenwart von katalytischen Mengen an Übergangsmetallen beispielsweise Ni, Pd, Pt, Ru oder Rh, die in geträgerter Form, beispielsweise auf Aktivkohle, in Form aktivierter Metalle, z.B. Raney-Nickel, oder in
- 30 Form löslicher Komplexverbindungen eingesetzt werden können. Geeignete Lösungsmittel für die Reduktion sind abhängig von der Löslichkeit des zu hydrierenden Substrates und dem gewählten Reduktionsmittel C_1 - C_4 -Alkohole, wie Methanol, Ethanol, n-Propanol, Isopropanol oder n-Butanol, halogenierte C_1 - C_6 -Kohlenwasserstoffe,
- 35 wie Dichlormethan, Trichlormethan, Trichlorethan, Trichlorethylen, aromatische Kohlenwasserstoffe, wie Benzol, Toluol, Xylol, Chlorbenzol, wässrige Lösungen anorganischer oder organischer Säuren, wie wässrige Salzsäure. Üblicherweise erfolgt die Reduktion bei Temperaturen im Bereich von -15 bis $+100^\circ\text{C}$, vorzugsweise
- 40 im Bereich von 0 bis 40°C . Die Reduktion mit Wasserstoff erfolgt üblicherweise bei einem Wasserstoffdruck im Bereich von 1 bis 50 bar, vorzugsweise im Bereich von 1 bis 10 bar. Zur katalytischen Hydrierung aromatischer Nitrogruppen siehe beispielsweise Rylander in "Catalytic Hydrogenation over Platinum Metals", Academic
- 45 Press, New York, 1967, 168-202; Furst et al., Chem. Rev. 1965, 65, 52; Tepko et al., J. Org. Chem. 1980, 45, 4992.

140

Die so erhaltenen o-Aminobenzoesäuren der allgemeinen Formel Xa (R = H) werden dann in einem weiteren Reaktionsschritt d) mit einem organischen Isothiocyanat (in Schema 1 Methylisothiocyanat) zu einem substituierten Thioharnstoffderivat umgesetzt, das ohne
5 weitere Isolierung oxidativ zur Benzothiazol-5-carbonsäure der allgemeinen Formel IX-1a (in Schema 1 mit $R^3 = \text{NH-CH}_3$) cyclisiert wird.

- Der erste Reaktionsschritt in Stufe d), nämlich die Umsetzung der
10 m-Aminobenzoesäure der allgemeinen Formel Xa zum substituierten Harnstoff erfolgt durch Umsetzung mit einem $\text{C}_1\text{-C}_6$ -Alkylisothiocyanat oder einem gegebenenfalls substituierten Phenylisothiocyanat in einem wasserfreien, organischen Lösungsmittel bei Temperaturen im Bereich von -15°C bis 150°C und vorzugsweise im Bereich von
15 -15°C bis 100°C . Geeignete Lösungsmittel sind beispielsweise aliphatische oder cycloaliphatische Kohlenwasserstoffe, wie n-Hexan oder Cyclohexan, halogenierte Kohlenwasserstoffe, wie Dichlormethan, Trichlormethan, Trichlorethan, Trichlorethylen, aromatische Kohlenwasserstoffe wie Benzol oder Anisol, Dialkylether oder cy-
20 clische Ether wie Diethylether, Methyl-tert.-butylether, Tetrahydrofuran oder Dioxan, wasserfreie Carbonsäuren wie Eisessig oder in Pyridin. Zur Herstellung substituierter Thioharnstoffe siehe beispielsweise: Kurzer, F., Org. Synth. 1951, 31, 21; R.R. Gupta et al., Synth. Commun. 17(2), 229-240 (1987); Rathke, Ber. Dtsch.
25 Chem. Ges. 1885, 18, 3102; Schiff, Justus Liebigs Ann. Chem., 1868, 148, 338; Frank, R.L., Smith, P.V.; Org. Synth. 1955, III, 735, N.B. Ambati et al., Synth. Commun. 1997, 27 (9), 1487-1493; W.O. Foye, J. Pharm. Sci., 1977, 66, No. 7, 923-926.
- 30 Das so erhaltene, substituierte Thioharnstoff-Derivat wird dann in einem zweitem Reaktionsschritt von Schritt d) mit einem halogenhaltigen Oxidationsmittel wie Brom, Sulfurylchlorid oder Chlor in einem inerten organischen Lösungsmittel zur substituierten 2-Aminobenzothiazol-5-carbonsäure der allgemeinen Formel IV-1a
35 (in Schema 1 steht R^3 für NH-CH_3) cyclisiert. Die Cyclisierung erfolgt in der Regel bei Temperaturen im Bereich von -15 bis $+150^\circ\text{C}$ und vorzugsweise im Bereich von 0 bis 120°C . Geeignete Lösungsmittel sind insbesondere die vorgenannten aliphatischen oder cycloaliphatischen Kohlenwasserstoffe, die vorgenannten aromatischen
40 Kohlenwasserstoffe, die vorgenannten wasserfreien Carbonsäuren, ferner $\text{C}_1\text{-C}_4$ -Alkanole, z.B. Methanol, Ethanol oder Isopropanol, Dialkylether, cyclische Ether und Mischungen der vorgenannten Lösungsmittel. Zur oxidativen Cyclisierung substituierter Thioharnstoffe zu Benzothiazolen siehe beispielsweise Houben-Weyl: "Me-
45 thoden der organischen Chemie V, Bd.E8B, 1994, S.865 f.

141

Die substituierte 2-Aminobenzothiazol-5-carbonsäure der allgemeinen Formel IV-1a kann entweder direkt mit einem Hydroxypyrazol der allgemeinen Formel III oder einem aktivierten Derivat davon in der oben beschriebenen Weise zur erfindungsgemäßen Verbindung 5 I (mit $Y = S$ und $X = C-NH-R''$, wobei R'' für C_1-C_6 -Alkyl oder gegebenenfalls substituiertes Phenyl steht) umgesetzt werden.

Sofern R^3 in Formel IV-1a für $NH-CH_3$ steht, können durch Hydrolyse gemäß Schritt e) auch die o-Aminothiobenzoesäuren der allgemeinen Formel VIII (mit $R = R' = H$) hergestellt werden. Der Hydrolyse folgt in der Regel noch die Methylierung zum Methylthioether VIII ($R = H$, $R' = CH_3$). Die Hydrolyse in Schritt e) erfolgt beispielsweise durch Umsetzung der Verbindung IV-1a (mit $R^3 = NH-CH_3$) mit einem Alkalihydroxid, z.B. Lithium-, Natrium- oder Kaliumhydroxid, einem Erdalkalihydroxid oder Alkaliiodiden, wie Natriumiodid 15 in einem geeigneten Lösungsmittel bei erhöhter Temperatur, wobei vorzugsweise in Abwesenheit von Sauerstoff gearbeitet wird. Übliche Reaktionstemperaturen liegen im Bereich von 0 bis $200^\circ C$, insbesondere im Bereich von 20 bis $180^\circ C$. Geeignete Lösungsmittel 20 sind neben den vorgenannten aliphatischen oder cycloaliphatischen Kohlenwasserstoffen, den halogenierten Kohlenwasserstoffen, den aromatischen Kohlenwasserstoffen, den vorgenannten Ethern und Alkoholen insbesondere wässrige, einphasige Systeme und Pyridin. Zur Verseifung der substituierten 2-Aminobenzothiazol-5-carbonsäuren siehe beispielsweise: Organikum, 16. Aufl. 1986, S. 415; Mc Murry, Org. React. 1976, 24, 187; Taschner et al., Roczn. Chem. 1956, 30, 323; z.B. Houben-Weyl: "Methoden der organischen Chemie", Band E8b, 1994; S.1010 f.; J. Chem. Soc. Perkin Trans., Part 1, 1976, No. 12, 1291-1296, insbesondere A.R. Katritzky et al., J. Heterocycl. Chem. 30 (1) 135-139, 1993. Die Umsetzung zum Methylthioether VIII mit $R = H$ und $R' = CH_3$ gelingt in einfacher Weise durch Umsetzung mit Methyljodid oder Dimethylsulfat. 25

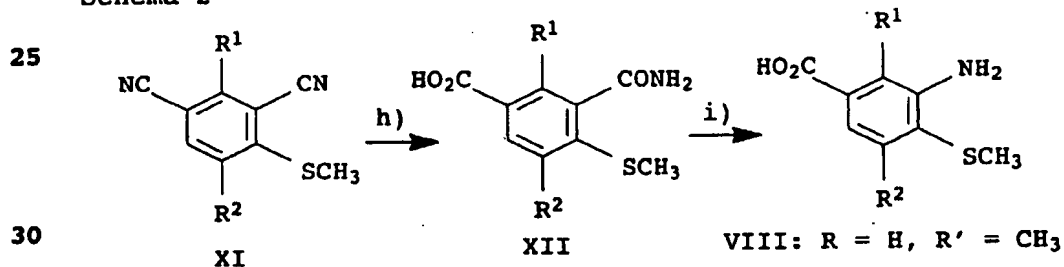
In ähnlicher Weise können Verbindungen der allgemeinen Formel 35 VIII mit $R = H$ erhalten werden, wenn man zunächst die 3-Aminobenzoesäure der allgemeinen Formel Xa mit einem C_1-C_4 -Alkanol, z.B. mit Methanol in bekannter Weise verestert. Der so erhaltene Ester der allgemeinen Formel Xb ($R = C_1-C_4$ -Alkyl, insbesondere Methyl) wird dann in Schritt f) mit Isothiocyansäure oder einem geeigneten Salz der Isothiocyansäure, z.B. Natriumrhodanid in Gegenwart einer konzentrierten Mineralsäure, zum Thioharnstoff-Derivat umgesetzt. Die Reaktionsbedingungen entsprechen dem unter Schritt d) für die Harnstoffderivate angegebenen Reaktionsbedingungen. Das Thioharnstoffderivat wird anschließend in Schritt g) unter 45 den oben genannten Bedingungen zum 2-Aminobenzothiazol-5-carbonsäureester der allgemeinen Formel IV-1b ($R^3 = NH_2$) cyclisiert. Die so erhaltene Verbindung der allgemeinen Formel IV-1b mit $R^3 = NH_2$

142

kann entweder in Schritt e' zur Verbindung VIII hydrolysiert und gegebenenfalls anschließend methyliert werden (VIII: $R = H$, $R' = CH_3$) werden.

- 5 Sie kann auch in der oben beschriebenen Weise zur erfindungsgemäßen Verbindung I (mit $X = C-NH_2$ und $Y = S$) umgesetzt werden. Zudem besteht die Möglichkeit, die 2-Aminogruppe der Verbindung IV-1b zunächst zu diazotieren und auf diesem Wege weitere Funktionalitäten in die 2-Position des Benzothiazolgerüsts einzuführen. Die
- 10 Umwandlung von $R^3 = NH_2$ in $R^3 = \text{Halogen}$ gelingt in bekannter Weise unter Sandmeyer-Bedingungen. Die Umwandlung von $R^3 = NH_2$ in $R^3 = H$ gelingt in bekannter Weise durch sukzessive Umsetzung des 2-Aminobenzothiazol-5-carbonsäureesters mit Nitrit unter sauren Bedingungen und anschließend einem Reduktionsmittel wie Hypophosphoriger Säure, Natriumborhydrid, Trialkylsilane, Trialkylstannane,
- 15 $SnCl_2$, NO, Wilkinsonkatalysatoren; siehe auch J. Am. Chem. Soc. 1949, 71, S.2137; J. Am. Chem. Soc. 1950, 72, S.3013; 1954, Bd.76, S.290.
- 20 Ein weiterer Zugang zu Verbindungen der allgemeinen Formel VIII wird in Schema 2 aufgezeigt.

Schema 2



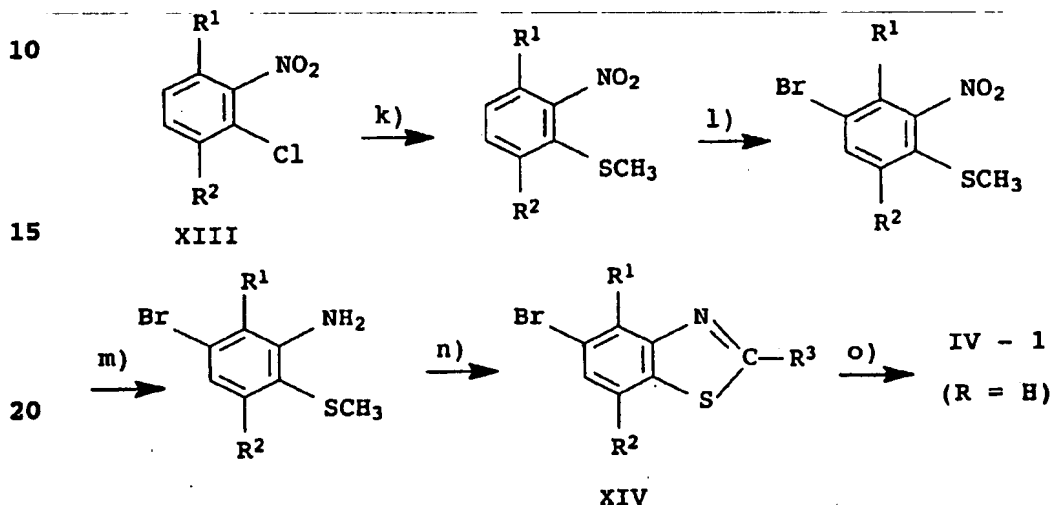
- Ausgehend von 2,4-Dicyanothioanisolen der allgemeinen Formel XI wird durch selektive Hydrolyse im Schritt h) das Amid der allgemeinen Formel XII hergestellt. Aufgrund der unterschiedlichen
- 35 Reaktivität der beiden Methylgruppen gelingt die Darstellung unter üblichen, alkalischen Verseifungsbedingungen, wobei man vorzugsweise das Fortschreiten der Reaktion kontrolliert. Verfahren zur alkalischen Verseifung von Nitrilen sind beispielsweise aus Org. Synth. Coll. Vol. 1, 1941, S.321 bekannt. In einem weiteren
- 40 Schritt i) wird dann die Amidfunktion in den Verbindungen der allgemeinen Formel XII im Sinne eines Hofmann-Abbaus in eine Aminofunktion umgewandelt. Hierbei werden Verbindungen der allgemeinen Formel VIII mit $R=H$ und $R'=CH_3$ erhalten. Typische Bedingungen für den Hofmann-Abbau sind: wässrig alkalische Chlor- oder Hy-
- 45 pochloridlösungen, Temperaturen im Bereich von 0 bis 150°C und

/43

vorzugsweise im Bereich von 20 bis 120°C (siehe auch Organikum 16. Auflage 1986, S. 572).

Ein weiterer Zugang zu Benzothiazol-5-carbonsäuren wird in 5 Schema 3 gezeigt. Dieser Zugang macht von der Umwandlung von Benzothiazolen der allgemeinen Formel XIV in entsprechende Carbonsäuren gemäß Reaktionsschritt o) Gebrauch.

Schema 3



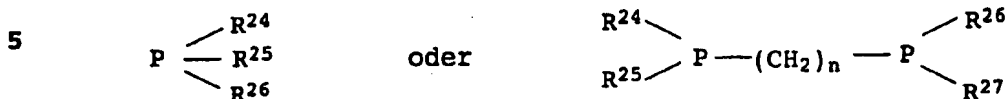
Die Umwandlung des Brombenzothiazols der allgemeinen Formel XIV 25 in die Carbonsäure der allgemeinen Formel IV-1 (R=H) gelingt beispielsweise durch sukzessive Umsetzung von XIV mit Magnesium zur entsprechenden Grignard-Verbindung und anschließender Umsetzung der Grignard-Verbindung mit Kohlendioxid. Alternativ kann die Verbindung XIV durch Halogen-Metallaustausch mit einem Alkalime- 30 tallalkyl, z.B. einem Lithiumalkyl, wie Methyllithium, n-Butyllithium oder tert-Butyllithium, und anschließende Umsetzung des Reaktionsproduktes mit CO₂ in die Verbindung IV-1 überführt werden.

Reaktionsschritt o) in Schema 3 kann auch durch Umsetzung des 35 5-Brombenzothiazols der allgemeinen Formel XIV mit Kohlenmonoxid, einer Base und Wasser unter erhöhtem Druck in Gegenwart eines Pd-, Ni-, Co- oder Rh-Katalysators realisiert werden.

Die Katalysatoren Nickel, Cobalt, Rhodium und insbesondere 40 Palladium können metallisch oder in Form üblicher Salze wie in Form von Halogenverbindungen, z.B. PdCl₂, RhCl₃·H₂O, Acetaten, z.B. Pd(OAc)₂, Cyaniden usw. in den bekannten Wertigkeitsstufen vorliegen. Ferner können Metallkomplexe mit tertiären Phosphinen, Metallalkylcarbonyle, Metallcarbonyle, z.B. CO₂(CO)₈, Ni(CO)₄, 45 Metallcarbonyl-Komplexe mit tertiären Phosphinen, z.B. (PPh₃)₂Ni(CO)₂, oder mit tertiären Phosphinen komplexierte Übergangsmetallsalze vorliegen. Die letztgenannte Ausführungsform ist

/44

insbesondere im Fall von Palladium als Katalysator bevorzugt. Dabei ist die Art der Phosphinliganden breit variabel. Beispielsweise lassen sie sich durch folgende Formeln wiedergeben:



- wobei n die Zahlen 1, 2, 3 oder 4 bedeutet und die Reste R^{24} bis R^{26} für niedermolekulares Alkyl, z.B. C_1 - C_6 -Alkyl, Aryl, C_1 - C_4 -Alkylaryl, z.B. Benzyl, Phenethyl oder Aryloxy stehen. Aryl ist z.B. Naphthyl, Anthryl und vorzugsweise gegebenenfalls substituiertes Phenyl, wobei man hinsichtlich der Substituenten nur auf deren Inertheit gegenüber der Carboxylierungsreaktion zu achten hat, ansonsten können sie breit variiert werden und umfassen alle inerten C-organischen Reste wie C_1 - C_6 -Alkylreste, z.B. Methyl, Carboxylreste wie COOH , COOM (M ist z.B. ein Alkali-, Erdalkalimetall oder Ammoniumsalz), oder C-organische Reste über Sauerstoff gebunden wie C_1 - C_6 -Alkoxyreste.
- 20 Die Herstellung der Phosphinkomplexe kann in an sich bekannter Weise, z.B. wie in den eingangs genannten Dokumenten beschrieben, erfolgen. Beispielsweise geht man von üblichen kommerziell erwerblichen Metallsalzen wie PdCl_2 oder $\text{Pd}(\text{OCOCH}_3)_2$ aus und fügt das Phosphin z.B. $\text{P}(\text{C}_6\text{H}_5)_3$, $\text{P}(\text{n-C}_4\text{H}_9)_3$, $\text{PCH}_3(\text{C}_6\text{H}_5)_2$, 1,2-Bis(diphenylphosphino)ethan hinzu.

Die Menge an Phosphin, bezogen auf das Übergangsmetall, beträgt üblicherweise 0 bis 20, insbesondere 0,1 bis 10 Moläquivalente, besonders bevorzugt 1 bis 5 Moläquivalente.

- 30 Die Menge an Übergangsmetall ist nicht kritisch. Natürlich wird man aus Kostengründen eher eine geringe Menge, z.B. von 0,1 bis 10 Mol.-%, insbesondere 1 bis 5 Mol.-%, bezogen auf den Ausgangsstoff IV.
- 35 Zur Herstellung der Benzothiazol-5-carbonsäuren IV-1 ($\text{R} = \text{OH}$) führt man die Umsetzung mit Kohlenmonoxid und mindestens äquimolaren Mengen an Wasser, bezogen auf die Ausgangsstoffe XIV durch. Der Reaktionspartner Wasser kann gleichzeitig auch als Lösungsmittel dienen, d.h. die maximale Menge ist nicht kritisch.

- Es kann aber auch je nach Art der Ausgangsstoffe und der verwendeten Katalysatoren von Vorteil sein, anstelle des Reaktionspartners ein anderes inertes Lösungsmittel oder die für die Carboxylierung verwendete Base als Lösungsmittel zu verwenden.

145

Als inerte Lösungsmittel kommen für Carboxylierungsreaktionen übliche Lösungsmittel wie Kohlenwasserstoffe, z.B. Toluol, Xylol, Hexan, Pentan, Cyclohexan, Ether z.B. Methyl-tert.butylether, Tetrahydrofuran, Dioxan, Dimethoxyethan, substituierte Amide
5 wie Dimethylformamid, persubstituierte Harnstoffe wie Tetra-C₁-C₄-alkylharnstoffe oder Nitrile wie Benzonitril oder Acetonitril in Betracht.

In einer bevorzugten Ausführungsform des Verfahrens verwendet man
10 einen der Reaktionspartner, insbesondere die Base, im Überschuß, so daß kein zusätzliches Lösungsmittel erforderlich ist.

Für das Verfahren geeignete Basen sind alle inerten Basen, die den bei der Umsetzung freiwerdenden Jodwasserstoff bzw. Brom-
15 wasserstoff zu binden vermögen. Beispielsweise sind hier tertiäre Amine wie tert.-Alkylamine, z.B. Trialkylamine wie Triethylamin, cyclische Amine wie N-Methylpiperidin oder N,N'-Dimethylpiperazin, Pyridin, Alkali- oder -hydrogencarbonate, oder tetraalkylsubstituierte Harnstoffderivate wie Tetra-C₁-C₄-alkyl-
20 harnstoff, z.B. Tetramethylharnstoff, zu nennen.

Die Menge an Base ist nicht kritisch, üblicherweise werden 1 bis 10, insbesondere 1 bis 5 Mol verwendet. Bei gleichzeitiger Verwendung der Base als Lösungsmittel, wird die Menge in der Regel
25 so bemessen, daß die Reaktionspartner gelöst sind, wobei man aus Praktikabilitätsgründen unnötig hohe Überschüsse vermeidet, um Kosten zu sparen, kleine Reaktionsgefäße einsetzen zu können und den Reaktionspartnern maximalen Kontakt zu gewährleisten.

30 Während der Umsetzung wird der Kohlenmonoxiddruck so eingestellt, daß immer ein Überschuß an CO, bezogen auf XIV vorliegt. Vorzugsweise liegt der Kohlenmonoxiddruck bei Raumtemperatur bei 1 bis 250 bar, insbesondere 5 bis 150 bar CO.

35 Die Carbonylierung wird in der Regel bei Temperaturen von 20 bis 250°C, insbesondere bei 30 bis 150°C kontinuierlich oder diskontinuierlich durchgeführt. Bei diskontinuierlichem Betrieb wird zweckmäßigerweise zur Aufrechterhaltung eines konstanten Druckes kontinuierlich Kohlenmonoxid auf das Umsetzungsgemisch auf-
40 ge-
preßt.

Die als Ausgangsverbindungen benutzten 5-Brombenzothiazole XIV sind bekannt oder können leicht durch geeignete Kombination bekannter Synthesen sowie nach der in Schema 3 beschriebenen Reak-
45 tionsfolge hergestellt werden.

146

Gemäß Schema 3 kann man beispielsweise o-Chlornitrobenzole der allgemeinen Formel XIII mit Alkalisalzen von Alkylmercaptanen in die entsprechenden o-Nitrothioether umwandeln (Schritt k). Der so erhaltene Thioether kann selektiv in der 3-Position zur Nitro-

5 gruppe bromiert werden (Schritt l). Übliche Bromierungsreagenzien sind für diesen Zweck neben Brom - gegebenenfalls in Kombination mit einer Lewis-Säure wie FeBr_3 , auch N-Bromsuccinimid, N-Bromhydantoin und Pyridiniumperbromid. Die Bromierung erfolgt vorzugsweise in einem organischen Lösungsmittel, beispielsweise einem

10 aliphatischen oder cycloaliphatischen Kohlenwasserstoff, Halogenkohlenwasserstoff oder wasserfreien organischen Säuren bei Temperaturen im Bereich von -15 bis 150°C , vorzugsweise im Bereich von -15 bis 100°C (siehe z.B. Organikum, 16. Aufl., 1986, S. 315). Anschließend wird in Schritt m) die Nitrogruppe zur Aminogruppe re-

15 duziert. Die Bedingungen für Schritt m) entsprechen den für Schritt c) in Schema 1 angegebenen Bedingungen. Anschließend wird der o-Aminothioether aus Schritt m) in Schritt n) zum 5-Brombenzothiazol XIV cyclisiert. Die hierfür erforderlichen Reaktionsbedingungen entsprechen den für Schritt a) in Schema 1 angegebenen

20 Bedingungen.

Zur Herstellung der Benzothiazol-S-dioxid-Verbindungen der allgemeinen Formel I ($\text{Y} = \text{SO}_2$) werden beispielsweise die Benzothiazol-5-carbonsäuren IV-1a oder IV-1b oder die 5-Brombenzothia-

25 zol-5-carbonsäuren XIV mit einem Oxidationsmittel umgesetzt, wobei das entsprechende S-Dioxid erhalten wird, das dann weiter wie beschrieben zur Zielverbindung der Formel I mit $\text{Y} = \text{SO}_2$ weiterverarbeitet wird. Bevorzugt wird jedoch zunächst der Thiomethylether der allgemeinen Formel VIII (Schema 1, Formel VIII mit $\text{R} = \text{H}$ und

30 $\text{R}' = \text{CH}_3$) zum S-Dioxid VIIIfc oxidiert und anschließend zur Benzothiazol-S-dioxid-5-carbonsäure der Formel IV-1c cyclisiert.

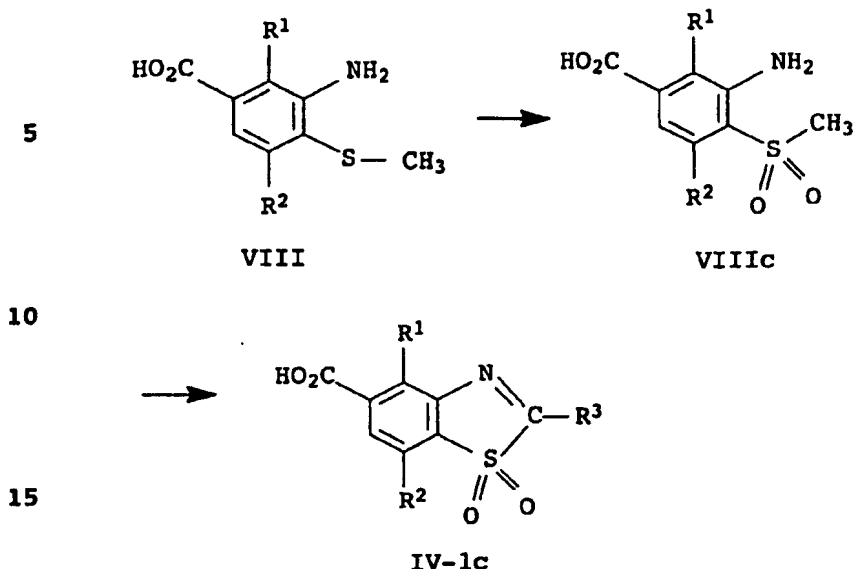
35

40

45

147

Schema 1a



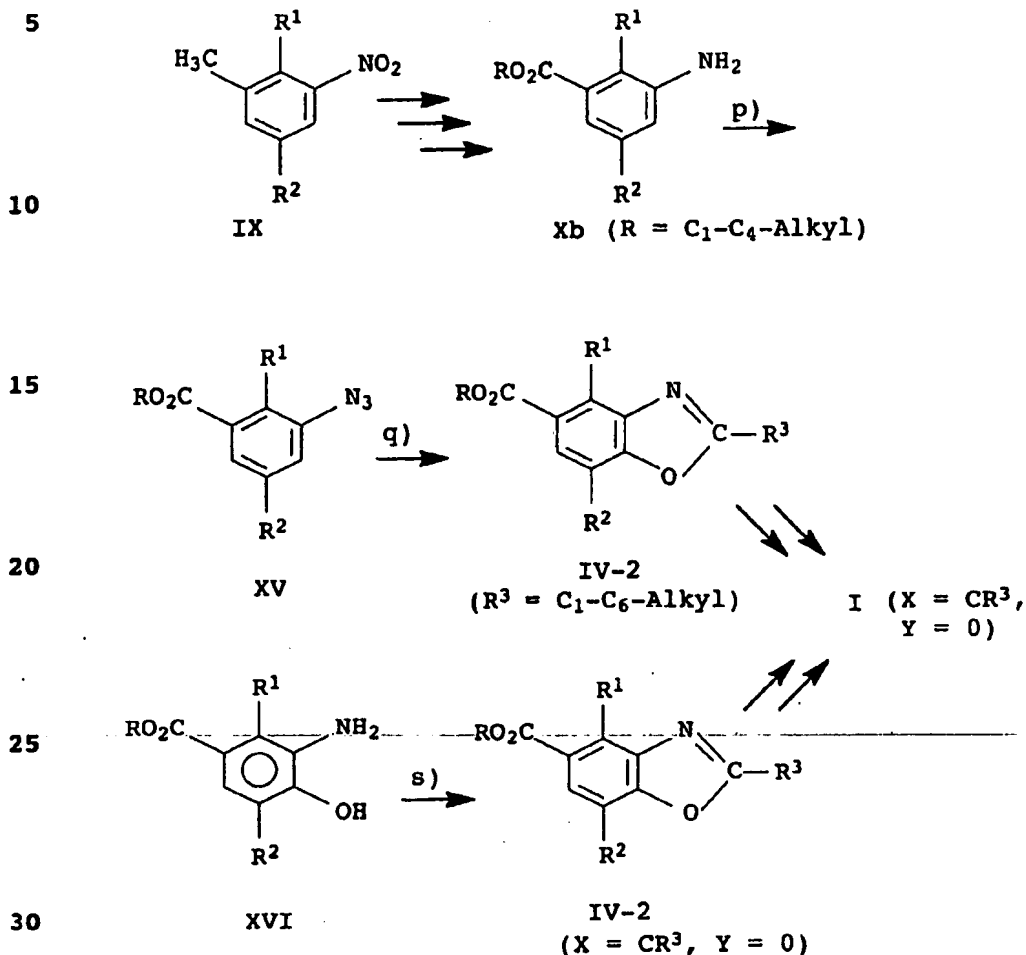
Die Oxidation von VIII zum S-Dioxid gelingt mit Oxidationsmitteln
 20 wie Peroxysäuren, z.B. m-Chlorperbenzoesäure, Peroxyessigsäure, Trifluorperoxyessigsäure oder mit Wasserstoffperoxid, das vorzugsweise zusammen mit einem Übergangsmetall-Katalysator, z.B. Natriumwolframat(VI), eingesetzt wird. Die Cyclisierung von o-Methylsulfonylaminobenzolen der Formel VIIIC gelingt in Anlehnung
 25 an die in Chem. Heterocycl. Comp. Bd.3, 1967, S.197 ff beschriebene Methode.

Eine Synthese für Benzoxazol-5-carbonsäurederivate der allgemeinen Formel IV-2 ($X = C-R^3$, $Y = O$) wird in Schema 4 beschrieben.
 30 Hierbei wird zunächst ausgehend von 3-Nitrotoluolen der allgemeinen Formel IX in der für Schema 1 beschriebenen Weise ein 3-Aminobenzoessäureester der allgemeinen Formel Xb ($R = C_1-C_4$ -Alkyl) hergestellt. In Schritt p) wird zunächst die Aminogruppe in Xb in bekannter Weise diazotiert und anschließend mit Alkaliaziden zu
 35 den entsprechenden 3-Azidobenzoessäuren der allgemeinen Formel XV umgesetzt. Das Azid XV wird anschließen in Reaktionsschritt q) mit einer Alkancarbonsäure, die gegebenenfalls auch halogeniert sein kann, z.B. Ameisensäure, Essigsäure, Trifluoressigsäure oder Propionsäure zum Benzoxazol-5-carbonsäureester der allgemeinen
 40 Formel IV-2a ($R^3: C_1-C_4$ -Alkyl) umgesetzt. Die Verbindung IV-2a kann entweder direkt zum erfindungsgemäßen Pyrazolylderivat der allgemeinen Formel I mit $X = CR^3$ und $Y = O$ umgesetzt werden oder alternativ in Reaktionsschritt r) zum o-Aminophenol der allgemeinen Formel XVI hydrolysiert werden. Die Verbindungen XVI können
 45 dann ähnlich wie die o-Aminothiophenole der allgemeinen Formel

148

VIII zu den Benzoxazol-5-carbonsäureestern der allgemeinen Formel IV-2 umgesetzt werden.

Schema 4



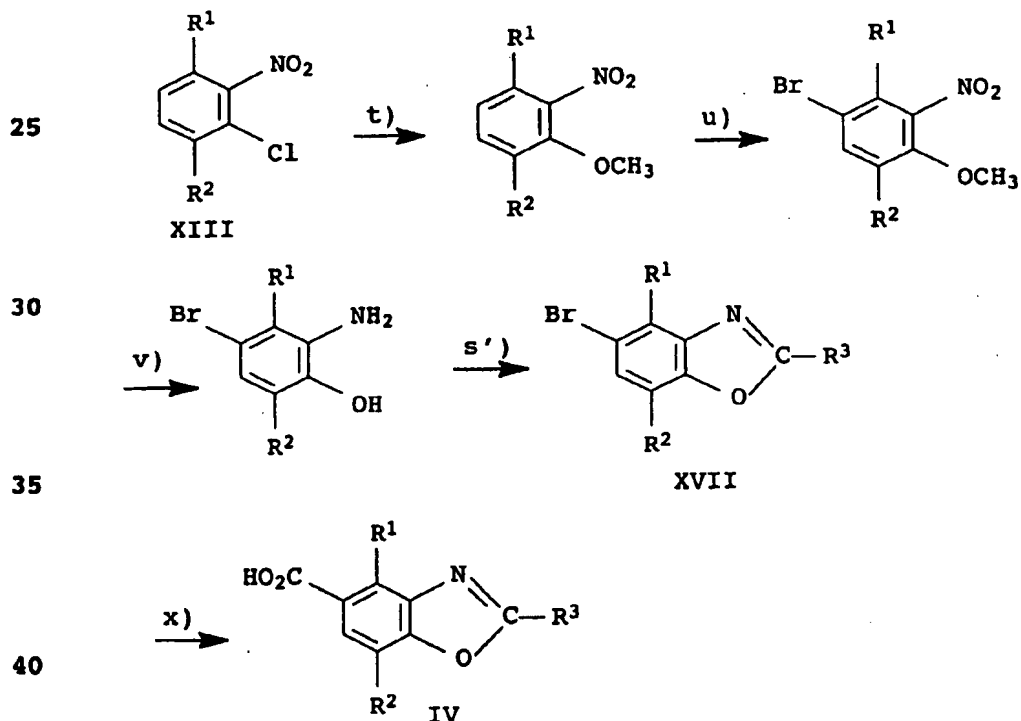
In Reaktionsschritt p) wird zunächst aus dem Amin der allgemeinen Formel Xb in wässriger saurer Lösung oder in einer wasserfreien Säure wie z.B. Ameisensäure, Essigsäure oder Trifluoressigsäure mit einem anorganischen Nitrit wie Natriumnitrit oder einem organischen Nitrit wie Isoamylnitrit eine aromatische Diazoniumverbindung hergestellt. Diese wird durch Zugabe eines Alkaliazids, beispielsweise Natriumazid zu der Lösung oder Suspension der Diazoniumverbindung umgesetzt, wobei man den 3-Azidobenzoessäureester gemäß Schema 4 erhält. Die Reaktionstemperatur der Umsetzung liegt in der Regel im Bereich von -15 bis +50°C, vorzugsweise im Bereich von 0 bis 20°C. Siehe auch K. G. Pinney et al., J. Org. Chem. [JOCEAH] 1991, 56 (9), 3125-3133.

149

Reaktionsschritt q) wird vorzugsweise in der zur Kondensation gewünschten wasserfreien Säure HOOC-R^3 in einem aromatischen Kohlenwasserstoff, wie Benzol, Toluol, Xylol oder Chlorbenzol durchgeführt. Die Reaktionstemperatur liegt in der Regel im Bereich von 50 bis 150°C und vorzugsweise im Bereich von 50 bis 145°C. (Siehe hierzu auch B. Decroix et al., Bull. Soc. Chim. Fr. 1976, 621; S. Chaudhury et al., Can. J. Chem. 1982, 60, 1122). Die Verseifung des in Schritt q) erhaltenen Benzoxazol-5-carbonsäureesters zum 3-Amino-4-hydroxybenzoesäureester der allgemeinen Formel XVI erfolgt beispielsweise unter den für Reaktionsschritt e) in Schema 1 angegebenen Bedingungen. Die Kondensation von Verbindung XVI zum Benzoxazol-5-carbonsäureester in Schritt s) erfolgt beispielsweise unter den für Schritt a) in Schema 1 angegebenen Reaktionsbedingungen. (Siehe zu Schritt s) auch Houben-Weyl "Methoden der organischen Chemie, Bd.E8a, 1993, S.1020 f.)

Ein anderer Zugang zu Benzoxazol-5-carbonsäuren der allgemeinen Formel IV ($\text{X} = \text{C-R}^3$, $\text{Y} = \text{O}$) ist in Schema 5 angegeben.

20 Schema 5



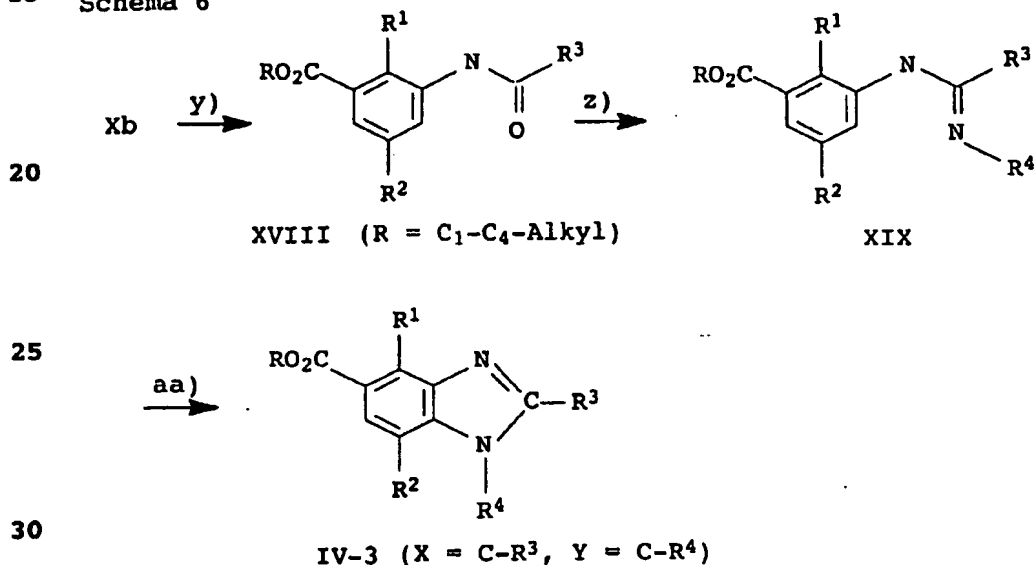
Hierbei wird zunächst ein o-Chlornitrobenzol der allgemeinen Formel XIII durch nukleophilen Austausch von Halogen gegen Methoxy in ein o-Nitroanisol überführt (Schritt t)). Dieses wird dann unter den für Schritt l) in Schema 3 angegebenen Reaktionsbedingungen

150

gen bromiert, wobei das Bromatom selektiv in die p-Position zur Methoxygruppe entritt. Das bromierte Nitroanisol wird dann zunächst selektiv zur Aminoverbindung reduziert und anschließend die Hydroxyfunktion durch Etherspaltung freigesetzt. Hierbei erhält man 2-Amino-4-bromphenole. Diese werden dann unter den für Schritt s) angegebenen Reaktionsbedingungen zum 5-Brombenzoxazol der allgemeinen Formel XVII cyclisiert. Die Verbindung XVII wird dann unter den für Schritt o) in Schema 3 beschriebenen Reaktionsbedingungen zu der Benzoxazol-5-carbonsäure der allgemeinen Formel IV ($X = C-R^3$ und $Y = O$) umgesetzt.

Ein Verfahren zur Herstellung von Benzimidazol-5-carbonsäureestern ist in Schema 6 angegeben.

15 Schema 6



Hierbei geht man zunächst wieder von 3-Nitrotoluolen aus, die in der zuvor beschriebenen Weise in 3-Aminobenzoessäureester der allgemeinen Formel Xb überführt werden. Die Verbindungen Xb werden dann in Reaktionsschritt y) mit einer Carbonsäure der allgemeinen Formel R^3-CO_2H oder einem reaktiven Carbonsäureäquivalent $RCOL^1$, worin L^1 die zuvor genannte Bedeutung hat, zu einem Carbonsäureamid der allgemeinen Formel XVIII umgesetzt. Hierin hat R^3 eine der zuvor angegebenen Bedeutungen. XVIII wird dann unter sauren Bedingungen, z.B. mit Phosgen oder Phosphorylchlorid, in ein Nitriliumion überführt, das mit einem Amin der allgemeinen Formel R^4-NH_2 oder mit Ammoniak abgefangen wird, wobei ein Iminoamid der Formel XIX entsteht. Die Verbindung XIX kann dann unter oxidierenden Bedingungen, wie beispielsweise für Reaktionsschritt b) oder g) in Schema 1 beschrieben, zum Benzimidazol-5-carbonsäureester

151

ster umgesetzt werden, der seinerseits zur Carbonsäure verseift werden kann.

Schritt y) wird in der Regel unter den für die Bildung von Amid-
5 aus Carbonsäuren oder Carbonsäurederivaten und aromatischen Aminen üblichen Reaktionsbedingungen hergestellt. Die Reaktionstemperatur liegt in der Regel im Bereich von -15 bis 200°C, vorzugsweise im Bereich von 20 bis 150°C.

- 10 Zur Herstellung des Iminoamids der allgemeinen Formel XIX wird zunächst das Amid der allgemeinen Formel XVIII unter Wasserausschluß in einem organischen Lösungsmittel, beispielsweise einem der vorgenannten cycloaliphatischen oder aromatischen Kohlenwasserstoffe oder einem Ether gelöst und mit einer anorganischen
15 Säure, beispielsweise Salzsäure oder Schwefelsäure, einer Lewis-Säure wie Titan-tetrachlorid oder einem Säurechlorid wie Sulfonylchlorid, Sulfurylchlorid, Phosphorylchlorid oder Phosgen in das Nitriliumion überführt. Die hierfür erforderlichen Temperaturen liegen in der Regel im Bereich von -15 bis 150°C und vorzugsweise im Bereich von 20 bis 140°C. Das Nitriliumion wird dann mit
20 Ammoniak oder einem Amin der allgemeinen Formel R^4-NH_2 abgefangen.

- Die Cyclisierung der Verbindung XIX zum Benzimidazol-5-carbonsäureester der allgemeinen Formel IV ($X = C-R^3$, $Y = C-R^4$) wird in der
25 Regel mittels eines Oxidationsmittels wie Bleitetraacetat, Thallium(III)nitrit, Sulfurylchlorid oder Natriumhypochlorid unter wasserfreien Bedingungen durchgeführt. Als Lösungsmittel dienen beispielsweise aliphatische oder cycloaliphatische Kohlenwasserstoffe, aromatische Kohlenwasserstoffe oder Ether. Die Umsetzung
30 erfolgt in der Regel bei Temperaturen im Bereich -15 bis +150°C und vorzugsweise im Bereich von 0 bis 140°C. Zur Herstellung von Benzimidazolen aus Iminoamiden siehe auch (Can. J. Chem. 1982, 60, S.1122).

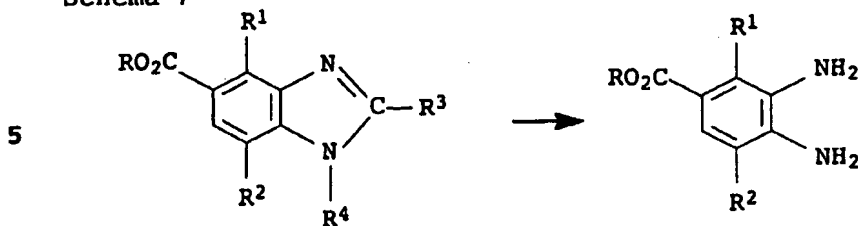
- 35 Die Herstellung von Benzoisothiodiazolen der allgemeinen Formel IV-4 ($X-Y = S=N$) gelingt beispielsweise ausgehend von Benzimidazol-5-carbonsäuren oder ihren Estern in der in Schema 7 beschriebenen Weise.

40

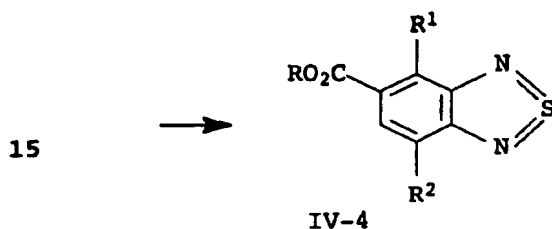
45

152

Schema 7

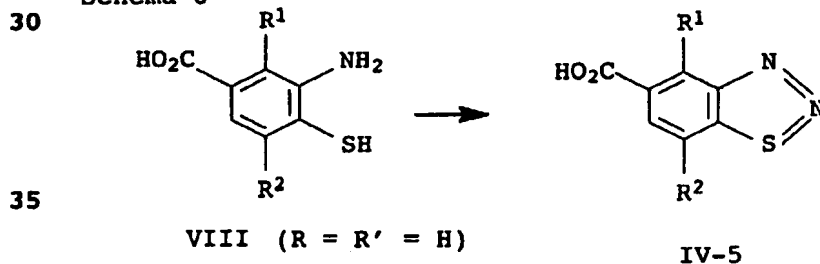
IV-3 ($X = C-R^3$, $Y = C-R^4$)

10 $R = H$ oder C_1-C_4 -Alkyl



Hierbei wird zunächst ein Benzimidazol-carbonsäureester oder die
 20 freie Carbonsäure zu 3,4-Diaminobenzoessäure verseift. Diese wird
 anschließend mit schwefliger Säure oder ihren Derivaten, z.B. SO_2
 oder SO_2Cl_2 , zur Benzoisothiadiazol-5-carbonsäure der allgemeinen
 Formel IV-4 cyclisiert. Üblicherweise wird die Cyclisierung bei
 25 Temperaturen im Bereich von 0 bis $200^\circ C$ und vorzugsweise im Be-
 reich von 50 bis $150^\circ C$, z.B. in einem Lösungsmittel oder in der
 Schmelze, durchgeführt (siehe auch: Chem. Ber. 1967, Bd.100,
 S. 2164).

Schema 8



40

45

153

Benzothiadiazol-5-carbonsäuren der allgemeinen Formel IV-5 ($X = N$, $Y = S$) können ausgehend von 2-Aminothiophenol-5-carbonsäuren der allgemeinen Formel VIII ($R = R' = H$) hergestellt werden. Hierzu wird man die Verbindungen der allgemeinen Formel VIII zu-

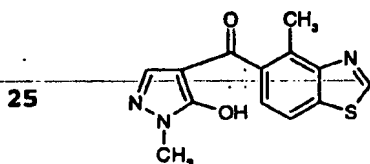
5 nächst diazotieren, beispielsweise durch Umsetzung mit organischem oder anorganischem Nitrit in einem wässrigen, neutralen Reaktionsmedium bei Temperaturen im Bereich von -15 bis $+20^{\circ}\text{C}$. Die wässrige Lösung oder Suspension des Diazoniumsalzes wird anschließend angesäuert, wobei sich die Verbindung der allgemeinen

10 Formel IV-5 bildet. Diese kann in konventioneller Weise aus der Reaktionsmischung, beispielsweise durch Extraktion mit einem organischen Lösungsmittel, gewonnen werden. Die Herstellung der Ausgangsverbindungen VIII ist in Schema 1 beschrieben. Die Herstellung der Benzothiadiazolcarbonsäuren IV-5 ($X = N$, $Y = S$) kann

15 beispielsweise in Anlehnung an das in der US 5,770,758 beschriebene Verfahren erfolgen.

Beispiele

20 4-[4'-Methylbenzothiazol-5'-ylcarbonyl]-5-hydroxy-1-methylpyrazol (Beispiel 1)



1.1 2-Methyl-4-thiocyano-isophthalsäuredinitril

30 Unter Erwärmen wurden 189 g (1 Mol) 2-Methyl-3-cyano-4-thiocyanoanilin in 1 kg Eisessig gelöst und danach wurden 400 g (4 Mol) konz. HCl und nach 15 min Rühren 400 ml Wasser zu so zugefügt, daß eine feinverteilte Suspension des Hydrochlorids entstand. Nach kurzem Rühren (15 bis 30 min) wurde bei -5 bis

35 0°C langsam eine Lösung von 69 g (1 Mol) Natriumnitrit in 140 ml Wasser zugetropft. In einem separaten Rührkolben wurden 245 g (5 Mol) NaCN in einer Mischung aus 1,5 l Wasser und 136 g (2 Mol) 25 proz. Ammoniakwasser gelöst und anschließend

40 250 g (1 Mol) $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$ zugegeben. Danach wurden bei 25°C eine zuvor bereitete und bei 0°C gehaltene Diazoniumlösung zügig in den Cu-Komplex zugetropft, wobei die Temperatur 40°C nicht überstieg. Nach Beendigung der Gasabspaltung wurde noch 30 min nachrühren gelassen. Man saugte den ausgefallenen

45 Feststoff ab und wusch ihn dreimal mit Wasser. Das Filtrat wurde mit 2 l Methylenchlorid extrahiert. Der Feststoff wurde dann in ein Rührgefäß gegeben und mit 1 l konz. HCl versetzt. Anschließend goß man den Methylenchlorid-Extrakt zu und ließ

154

- 15 min rühren. Nach Abtrennen der organischen Phase und Abfiltrieren ungelöst gebliebener Anteile wurde dreimal mit Wasser gewaschen und nach Trocknung über Natriumsulfat eingengt. Zur Abtrennung unerwünschter Bestandteile wurde das
- 5 Rohprodukt in Ethylacetat gelöst, vom Ungelösten filtriert und die Lösung anschließend eingengt. Ausbeute: 170 g (85%). Smp.: 95 - 107°C

1.2 3-Methyl-2,4-dicyanothiophenol

- 10 Zu einer Lösung von 170 g (0,85 Mol) 2 Methyl-4-thiocyanoisophthalsäuredinitril in 850 ml Methanol, wurden bei 25 bis 35°C eine Lösung von 110,5 g (0,85 Mol) 60 proz. Natriumsulfid in 425 ml Wasser zugetropft und drei Stunden bei Raumtemperatur nachrühren gelassen. Danach wurde mit 1000 ml Wasser
- 15 versetzt und mit Methyl-tert.-butylether extrahiert. Die wässrige Phase wurde durch Ansäuern mit HCl auf pH 1 gebracht und das Thiophenol mit Methylenchlorid extrahiert. Nach dreimaligem Waschen des Extraktes mit Wasser wurde die organische
- 20 Phase abgetrennt, über Natriumsulfat getrocknet und eingengt. Ausbeute: 150 g (99%). Smp.: 172 - 179°C

1.3 3-Methyl-2,4-dicyano-thioanisol

- 25 50g (0,29 Mol) 3-Methyl-2,4-dicyano-thiophenol wurden in eine Lösung von 23 g (0,58 Mol) NaOH in 400 ml Wasser gegeben und dann wurden bei 25 bis 35°C 73 g (0,58 Mol) Dimethylsulfat zugetropft. Nach 16 h Nachrühren bei 25°C war ein Feststoff
- 30 ausgefallen, der abgesaugt wurde, zweimal mit Wasser gewaschen und dann aus Eisessig/Wasser umkristallisiert wurde. Ausbeute: 43 g (80%). Smp.: 176 - 181°C

35 1.4 2-Methyl-3-aminocarbonyl-4-methylsulfanylbzenoesäure

- 34g (0,181 Mol) 3-Methyl-2,4-dicyanothioanisol wurden in einer Lösung von 21,7 g (0,54 Mol) NaOH in 200 ml Wasser suspendiert und 8 h zum Sieden erhitzt. Nach dem Abkühlen fiel
- 40 ein Teil des Produktes aus und wurde durch Absaugen und Waschen mit Wasser isoliert. Das noch alkalische Filtrat wurde mit MTBE extrahiert, der Extrakt wurde verworfen. Die wässrige Phase wurde mit konz. HCl angesäuert (pH 1) und mit Ethylacetat extrahiert. Ausbeute: 29 g (71%).
- 45 Smp.: 230 - 240°C

1.5 3-Amino-2-methyl-4-methylsulfanylbzenzoesäure

a) aus 2-Methyl-3-aminocarbonyl-4-methylsulfanylbzenzoesäure

5 Zu einer Lösung von 3,64 g NaOH (0.09 mol) in 40 ml Wasser wurden bei 0°C 2,9 g Brom (0.018 mol) getropft. Anschließend wurden 4,1 g 2-Methyl-3-aminocarbonyl-4-methylsulfanylbzenzoesäure (0,018 mol) bei 0°C portionsweise zugegeben. Man ließ 1-h bei 0°C rühren und erwärmte danach auf 20°C. Anschließend
10 wurde die Reaktionsmischung mit 10 %iger HCl sauer gestellt und mit Ethylacetat extrahiert. Der anfallende Niederschlag wurde mehrmals mit Ethylacetat aufgeschlämmt und getrocknet. Ausbeute: 0,95 g (27%).

15 b) aus 2-Amino-4-methylbenzothiazol-5-carbonsäuremethylester

10 g 2-Amino-4-methyl-benzothiazol-5-carbonsäure-methylester (0,045 mol) wurden in einer Mischung aus 120 ml Wasser, 120 ml Ethylenglykol und 50 g NaOH gelöst und 20 h bei 130°C gerührt. Danach wurde mit 50 g Eis verdünnt, 3 Tropfen
20 (n-Bu)₄N⁺OH⁻ - Lösung zugegeben und zum Schluß wurden bei 20°C 6,25 ml Dimethylsulfat ((0,05 mol) in 15 ml Toluol zuge-
tropft. Nach 30 min wurde mit konz. HCl angesäuert und der Niederschlag abgesaugt, mit Wasser gewaschen und getrocknet.
25 Ausbeute: 7 g (71%).
Smp.: 225°C (Zers.)

1.6 3-Amino-2-methyl-4-methylsulfanylbzenzoesäuremethylester

30 2 g 3-Amino-2-methyl-4-methylsulfanylbzenzoesäure (0,01 mol) wurden in 20 ml Methanol gelöst, mit 2,0 g konz. Schwefelsäure versetzt und für 2 h auf 60°C erwärmt. Nach dem Abkühlen wurde die Reaktionsmischung auf Wasser gegeben, neutralisiert und mit Ethylacetat extrahiert. Nach Waschen, Trocknen
35 wurde das Lösungsmittel entfernt. Ausbeute: 1,3 g (62%).
Smp.: 98 - 103°C

1.7 3-Formamidyl-2-methyl-4-methylsulfanylbzenzoesäuremethylester

40 Zu einer Mischung aus 30 ml Essigsäureanhydrid und 2,2 g Ameisensäure (0,05 mol) wurde bei 40°C portionsweise 4,75 g 3-Amino-2-methyl-4-methylsulfanylbzenzoesäuremethylester (0,05 mol) gegeben. Nach 5 h ließ man abkühlen, gab die Lösung auf Eiswasser und extrahierte erschöpfend mit Methylenchlorid.
45 Die organischen Phasen wurden gewaschen, getrocknet und anschließend wurde das Lösungsmittel entfernt. Ausbeute: 4,7 g (0,044 mol).

156

Smp.: 170 – 176°C

1.8 4-Methylbenzothiazol-5-carbonsäuremethylester

- 5 a) aus 3-Formamidyl-2-methyl-4-methylsulfanylbzenoesäuremethylester

2,4 g 3-Formamidyl-2-methyl-4-methylsulfanylbzenoesäuremethylester (0,01 mol) wurden in Methylenchlorid gelöst. Phosgen wurde bis zur Sättigung eingegast und anschließend wurde überschüssiges Phosgen mit Stickstoff vertrieben. Danach wurden 1,5 g Triethylamin zugetropft. Nach Entfernen des Lösungsmittels im Vakuum wurde der Rückstand in Ethylacetat aufgenommen, das Salz abfiltriert und die organische Phase erneut eingeeengt. Der Rückstand wurde säulenchromatographisch an Kieselgel gereinigt. Ausbeute: 1,6 g (77%).

b) aus 2-Amino-4-methylbenzothiazol-5-carbonsäuremethylester

- 20 15 g 2-Amino-4-methylbenzothiazol-5-carbonsäuremethylester (0,07 mol) wurden in 450 ml Phosphorsäure vorgelegt und auf -8°C abgekühlt. Dann wurden 27,9 g NaNO₂ (0,4 mol) in 30 ml Wasser so zugetropft, daß die Temperatur nicht über -4°C stieg. Anschließend wurde das Diazoniumsalz bei 5 bis 10°C zu 25 169 ml Hypophosphoriger Säure getropft und über Nacht bei 20°C gerührt. Anschließen wurde die Reaktionslösung neutralisiert und erschöpfend mit Ethylacetat extrahiert. Nach Waschen und Trocknen der organischen Phasen wurde das Lösungsmittel entfernt. Ausbeute: 6,84 g (49%).
- 30 Smp.: 90 – 92°C

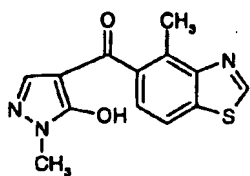
1.9 4-Methylbenzothiazol-5-carbonsäure

- 35 16,6 g 4-Methylbenzothiazol-5-carbonsäure-methylester (0,08 mol) wurden in 280 ml 5 %iger Kalilauge gelöst und für 2,5 h auf Rückfluß erhitzt. Nach dem Abkühlen wird mit Phosphorsäure sauer gestellt. Das Produkt wurde abfiltriert und anschließend getrocknet. Ausbeute: 14,34 g (93%).
- Smp.: 260 – 265°C

- 40 1.10 4-Methylbenzothiazol-5-carbonsäure-(1'-methylpyrazol-5-yl)-ester

45

157



5

0,65 g 4-Methylbenzothiazol-5-carbonsäure (0,004 mol) und
 0,33 g 1-Methyl-5-hydroxy-pyrazol (0,004 mol) wurden in 30 ml
 abs. Acetonitril gelöst und mit 0,65 g EDC (0,004 mol),
 0,5 ml Triethylamin und einer kat. Menge DMAP versetzt. Nach
 beendeter Reaktion wurde die Lösung auf Wasser gegeben und
 mit Ethylacetat extrahiert. Nach Waschen und Trocknen der or-
 ganischen Phase wurde das Produkt durch säulenchromatogra-
 phisch an Kieselgel gereinigt. Ausbeute: 0,42 g (41%).
¹H-NMR (CDCl₃, TMS): δ = 3,18 (s, 3H); 3,83 (s, 3H); 6,24 (d,
 1H); 7,49 (d, 1H); 7,94 (d, 1H); 8,21 (d, 1H); 9,08 (s, 1H)
 ppm.

15

EDC = Ethyl-(3'-Dimethylaminopropyl)carbodiimid
 DMAP = 4-Dimethylaminopyridin

20

1.11 4-(4'-Methylbenzothiazol-5'-ylcarbonyl)-5-hydroxy-1-me- thylpyrazol

25

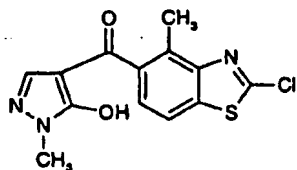
0,38 g 4-Methylbenzothiazol-5-carbonsäure-(1'-methylpyra-
 zol-5-yl)-ester (1,39 mmol) wurden in 25 ml Dioxan gelöst und
 mit 0,28 g K₂CO₃ (2 mmol) versetzt. Man refluxierte bis zum
 vollständigen Umsatz, entfernte das Lösungsmittel im Vakuum
 und nahm den Rückstand mit Wasser auf. Die wässrige Phase
 wurde mit Methylenchlorid extrahiert, auf pH 2 eingestellt
 und mit Ethylacetat extrahiert. Nach Entfernen des Lösungs-
 mittels wurde das Produkt durch Ausrühren gereinigt. Aus-
 beute: 0,25 g (66%)
 Smp.: 149 - 150°C

30

35

4-(2'-Chlor-4'-methylbenzothiazol-5'-ylcarbonyl)-5-hydroxy-1-me- thylpyrazol (Beispiel 2)

40



2.1 3-Amino-2-methylbenzoesäuremethylester

45

158

210 g 2-Methyl-3-nitrobenzoesäuremethylester (1,08 mol) wurden in 4 l Methanol glöst, mit 21 g Pd/C versetzt und anschließend bei Raumdruck hydriert. Nach beendeter Reaktion wurde vom Katalysator abfiltriert und das Lösungsmittel entfernt. Ausbeute: 178 g (quant.).

¹H-NMR (CDCl₃, TMS): δ = 2,34 (s, 3H); 3,60 (s, br, 2H, NH₂); 3,84 (s, 3H); 6,80 (d, 1H); 7,04 (dd, 1H); 7,21 (d, 1H) ppm.

2.2 N-(2-Methyl-3-methoxycarbonylphenyl)thioharnstoff

90,7 g 3-Amino-2-methylbenzoesäuremethylester (0,55 mol) wurden in 510 ml Chlorbenzol gelöst und bei -5°C mit 14 ml konz. Schwefelsäure und 49 g Natriumrhodanid (0,6 mol) versetzt. Anschließend wurden 2 ml 15-Krone-5 zugegeben und die Reaktionsmischung wird für 13 h auf 100°C erhitzt. Nach dem Abkühlen wurde der Feststoff abgesaugt, mit Wasser gewaschen und getrocknet. Ausbeute: 104,8 g (85%).
Smp.: 198°C

2.3 2-Amino-4-methylbenzothiazol-5-carbonsäuremethylester

56 g N-(2-Methyl-3-methoxycarbonylphenyl)thioharnstoff (0,25 mol) wurden in 2 l Chlorbenzol gelöst und auf 0°C abgekühlt. Anschließend wurden 40 g Brom (0,25 mol) in 100 ml Chlorbenzol zugetropft. Die Reaktionsmischung wurde für 3 h auf 90°C erhitzt, der Niederschlag abgesaugt und mit Methylenchlorid gewaschen. Anschließend wurde er in Ethylacetat gelöst und mit Natriumhydrogencarbonat-Lösung ausgeschüttelt. Nach Waschen und Trocknen wurde das Produkt durch Entfernen des Lösungsmittels erhalten. Ausbeute: 43 g (80%).
Smp.: 220°C

2.4 2-Chlor-4-methylbenzothiazol-5-carbonsäuremethylester

Zu einer Lösung von 5 g 2-Amino-4-methylbenzothiazol-5-carbonsäuremethylester (0,02 mol) in 150 ml Phosphorsäure wurde bei -8°C eine Lösung von 9,3 g NaNO₂ (0,14 mol) in 10 ml Wasser getropft. Anschließend wurde bei 5°C eine Lösung aus 3 g CuCl und 12 ml konz. HCl zugetropft. Die Reaktionsmischung wurde auf 100°C erwärmt. Nach dem Abkühlen wird der Rückstand abgesaugt, mit Wasser gewaschen und getrocknet. Das Produkt wurde durch Säulenchromatographie an Kieselgel gereinigt. Ausbeute: 3 g (55, %).
¹H-NMR (CDCl₃, TMS) δ = 2,98 (s, 3H); 3,95 (s, 3H); 7,67 (d, 1H); 7,95 (d, 1H) ppm.

159

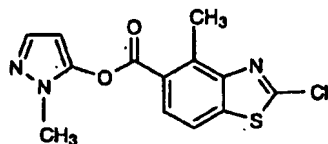
2.5 2-Chlor-4-methylbenzothiazol-5-carbonsäure

3 g 2-Chlor-4-methylbenzothiazol-5-carbonsäuremethylester (0,012 mol) wurden in 50 ml THF gelöst, auf 0°C abgekühlt und mit einer Lösung von 0,6 g LiOH in 20 ml Wasser versetzt. Nach 1 h ließ man auf 20°C erwärmen und rührte weitere 20 h nach. Anschließend wurde das Lösungsmittel im Vakuum entfernt, die wässrige Phase mit Phosphorsäure angesäuert und mit Ethylacetat extrahiert. Nach Waschen und Trocknen wird das Produkt durch Entfernen des Lösungsmittels erhalten. Ausbeute: 2,6 g (92%).

Smp.: >250°C

¹H-NMR (D₆-DMSO, TMS) δ = 2,85 (s, 3H); 7,90 (d, 1H); 8,02 (d, 1H) ppm.

2.6 3-Chlor-4-methylbenzothiazol-5-carbonsäure-(1'-methylpyrazol-5'-yl)ester



1 g 3-Chlor-4-methylbenzothiazol-5-carbonsäure (4,4 mol) und 0,46 g 1-Methyl-5-hydroxy-pyrazol (4,7 mol) wurden in 50 ml abs. Acetonitril gelöst und mit 1 g EDC, 0,7 ml Triethylamin und einer kat. Menge DMAP versetzt. Nach beendeter Reaktion wurde die Lösung auf Wasser gegeben und mit Ethylacetat extrahiert. Nach Waschen und Trocknen der organischen Phase wurde das Produkt durch Kristallisation/Säulenchromatographie gereinigt. Ausbeute: 0,22 g (16%).

¹H-NMR (CDCl₃, TMS) δ = 3,08 (s, 3H); 3,80 (s, 3H); 6,25 (s, 1H); 7,46 (s, 1H); 7,77 (d, 1H); 8,17 (d, 1H) ppm.

2.7 4-(3'-Chlor-4'-methylbenzothiazol-5'-ylcarbonyl)-5-hydroxy-1-methylpyrazol

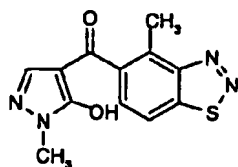
0,22 g 3-Chlor-4-methylbenzothiazol-5-carbonsäure-(1'-methylpyrazol-5'-yl)-ester (0,7 mol) wurden in 35 ml Dioxan gelöst und mit 0,5 g K₂CO₃ versetzt. Man refluxierte bis zum vollständigen Umsatz, entfernte das Lösungsmittel im Vakuum und nahm den Rückstand mit Wasser auf. Die wässrige Phase wurde mit Methylenchlorid extrahiert, auf pH 2 eingestellt

160

und mit Ethylacetat extrahiert. Nach Entfernen des Lösungsmittels wurde das Produkt durch Ausrühren gereinigt. Ausbeute: 0,19 g (86%).

¹H-NMR (CDCl₃, TMS) δ = 2,82 (s, 3H); 3,76 (s, 3H); 7,40 (s, 1H); 7,52 (d, 1H); 7,73 (d, 1H) ppm.

4-(4'-Methylbenzothiadiazol-5'-ylcarbonyl)-5-hydroxy-1-methylpyrazol (Beispiel 3)



3.1 4-Methylbenzothiadiazol-5-carbonsäure

5 g 2-Amino-4-methylbenzothiazol-5-carbonsäuremethylester (0,02 mol) wurden in 28,6 g 50 %iger KOH bei 120°C 4 h gerührt. Anschließend wurde mit 10 %iger HCl neutralisiert und mit einem Überschuß 40 %iger NaNO₂-Lösung bei 0 bis 10°C versetzt. Die Reaktionsmischung wurde angesäuert und mit Ethylacetat extrahiert. Nach Waschen und Trocknen wurde das Produkt durch Entfernen des Lösungsmittels erhalten. Ausbeute: 1,3 g (28%).

3.2 4-(4'-Methylbenzothiadiazol-5'-ylcarbonyl)-5-hydroxy-1-methylpyrazol

1,3 g 4-Methylbenzothiadiazol-5-carbonsäure (6,3 mmol) und 0,65 g 1-Methyl-5-hydroxy-pyrazol (6,6 mmol) wurden in 50 ml abs. Acetonitril gelöst und mit 1,4 g EDC (7,5 mmol), 1 ml Triethylamin und einer kat. Menge DMAP versetzt. Nach beendeter Reaktion wurde die Lösung auf Wasser gegeben und mit Ethylacetat extrahiert. Nach Waschen und Trocknen der organischen Phase wurde das Produkt säulenchromatographisch an Kieselgel gereinigt. Ausbeute: 0,7 g (39%).
Smp.: 152-153°C

3.3 4-(4'-Methylbenzothiadiazol-5'-ylcarbonyl)-5-hydroxy-1-methylpyrazol

0,7 g 4-Methyl-benzothiadiazol-5-carbonsäure-(1'-methylpyrazol-5-yl)-ester (2,4 mmol) wurden in 40 ml Dioxan gelöst und mit 0,5 g K₂CO₃ versetzt. Man refluxierte bis zum vollständigen Umsatz, entfernte das Lösungsmittel im Vakuum und nahm

161

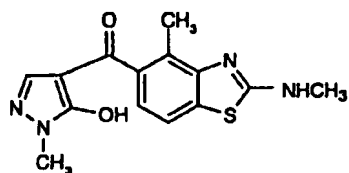
den Rückstand mit Wasser auf. Die wässrige Phase wurde mit Methylenchlorid extrahiert, auf pH 2 eingestellt und mit Ethylacetat extrahiert. Nach Entfernen des Lösungsmittels wurde das Produkt durch Ausrühren gereinigt. Ausbeute: 0,65 g

5 (93%).

Smp.: 207-209°C

4-(2'-Methylamino-4'-methylbenzothiazol-5'-ylcarbonyl)-5-hydroxy-1-methylpyrazol (Beispiel 4)

10



15

4.1 2-Methylamino-4-methyl-benzothiazol-5-carbonsäure

20

99 g 3-Amino-2-methylbenzoesäure (0,655 mol) aus wurden in 500 ml Essigsäure vorgelegt und bei 80°C mit 51 g Methylisothiocyant (7 mol) in 100 ml Essigsäure versetzt. Nach 2h wurden 106 g Brom (0,66 mol) in 20 ml Essigsäure bei 50°C zuge-

25 getropft. Anschließend wurde für 2 h ca. 100°C erhitzt und nach beendeter Reaktion abkühlen lassen. Der Niederschlag wurde abfiltriert, das Filtrat auf ca. 50 ml eingengt und das restliche Filtrat sowie den Niederschlag auf Wasser gegeben. Die wässrige Phase wurde auf pH 5 eingestellt und bei

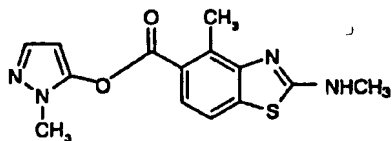
30 80°C wurde der Niederschlag abfiltriert. Anschließend wurde dieser mit Wasser gewaschen und getrocknet. Ausbeute: 66 g (42%).

¹H-NMR (D₆-DMSO, TMS) δ = 2,72 (s, 3H); 2,95 (d, 3H); 7,46 (d, 1H); 7,57 (d, 1H); 8,04 (q, 1H, NH) ppm.

35

4.2 2-Methylamino-4-methyl-benzothiazol-5-carbonsäure-(1'-methylpyrazol-5-yl)-ester

40



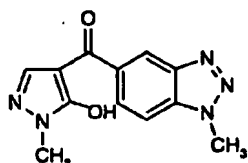
45

162

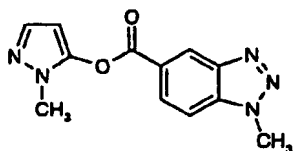
3,1 g 2-Methylamino-4-methyl-benzothiazol-5-carbonsäure (0,014 mol) und 1,4 g 1-Methyl-5-hydroxypyrazol (0,015 mol) wurden in 110 ml abs. Acetonitril gelöst und mit 2,67 g EDC (0,014 mol), 1,2 ml Triethylamin und einer kat. Menge DMAP versetzt. Nach beendeter Reaktion wurde die Lösung auf Wasser gegeben und mit Ethylacetat extrahiert. Nach Waschen und Trocknen der organischen Phase wurde das Produkt durch Kristallisation gereinigt. Ausbeute: 2,2 g (52%).

¹H-NMR (D₆-DMSO): δ = 2,80 (s, 3H); 3,00 (d, 3H); 3,73 (s, 3H); 6,22 (d, 1H); 7,43 (d, 1H); 7,72 (d, 1H); 7,84 (d, 1H); 8,20 (s, br, 1H) ppm.

4-(1'-Methylbenzotriazol-5-ylcarbonyl)-5-hydroxy-1-methylpyrazol (Beispiel 5)



5.1 1-Methylbenzotriazol-5-carbonsäure-(1'-methylpyrazol-5-yl)ester



1,5 g 1-Methylbenzotriazol-5-carbonsäure (8,5 mmol) und 0,87 g 1-Methyl-5-hydroxy-pyrazol (8,9 mmol) wurden in 70 ml abs. Acetonitril gelöst und mit 1,62 g EDC (8,5 mmol), 2 ml Triethylamin und einer kat. Menge DMAP versetzt. Nach beendeter Reaktion wurde die Lösung auf Wasser gegeben und mit Ethylacetat extrahiert. Nach Waschen und Trocknen der organischen Phase wurde das Produkt durch Kristallisation gereinigt. Ausbeute: 0,77 g (35%).

¹H-NMR (CDCl₃, TMS): δ = 3,82 (s, 3H); 4,40 (s, 3H); 6,28 (d, 1H); 7,48 (d, 1H); 7,67 (d, 1H); 8,36 (d, 1H); 8,98 (s, 1H) ppm.

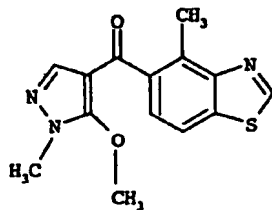
5.2 4-(1'-Methylbenzotriazol-5-ylcarbonyl)-5-hydroxy-1-methylpyrazol

5 0,53 g 1-Methyl-benzotriazol-5-carbonsäure-(1'-methylpyrazol-5-yl)-ester (2 mmol) wurden in 30 ml Dioxan gelöst und mit 0,43 g K₂CO₃ (3 mmol) versetzt. Man refluxierte bis zum vollständigen Umsatz, entfernte das Lösungsmittel im Vakuum und nahm den Rückstand mit Wasser auf. Die wässrige Phase
10 wurde mit Methylenchlorid extrahiert, auf pH 2 eingestellt und mit Ethylacetat extrahiert. Nach Entfernen des Lösungsmittels wurde das Produkt durch Ausrühren gereinigt. Ausbeute: 0,31 g (58%).
15 ¹H-NMR (CDCl₃, TMS): δ = 3,78 (s, 3H); 4,39 (s, 3H); 4,75 (s, br, 1H); 7,63 (d, 1H); 7,86 (s, 1H); 8,08 (d, 1H); 8,56 (s, 1H) ppm.

6. 4-(4'-Methylbenzothiazol-5'-ylcarbonyl)-5-methoxy-1-methylpyrazol (Beispiel 6)

20

25



30

35

Zu einer Mischung aus 0,3 g 4-(4'-Methylbenzothiazol-5'-ylcarbonyl)-5-hydroxy-1-methylpyrazol aus Beispiel 1 und 0,18 g Kaliumcarbonat in 15 ml Dimethylformamid wurden bei Raumtemperatur 0,26 g Iodmethan getropft. Die Mischung wurde 75 min bei 50°C und über Nacht bei Raumtemperatur gerührt. Zur Aufarbeitung wurde die Reaktionsmischung auf Wasser gegeben und mit Methyl-tert.-butylether extrahiert. Nach Waschen und Trocknen der vereinigten organischen Phasen und Entfernen des Lösungsmittels erhielt man die Verbindung I-le.394 in Form weißlich-gelber Kristalle. Ausbeute: 0,15 g (48%).
Smp.: 138-141°C.

40

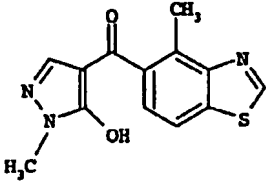
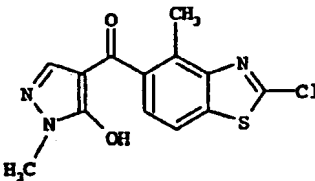
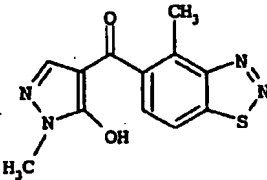
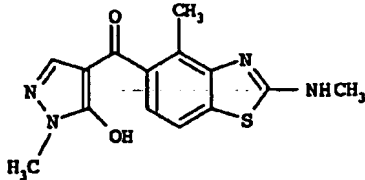
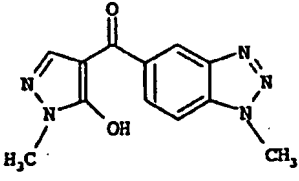
45

In analoger Weise wurden durch Umsetzung der Verbindung I-la.394 aus Beispiel 1 mit Benzylbromid die Verbindung des Beispiels 13 (I-lg.394) und durch Umsetzung mit dem jeweiligen Säurechlorid die Verbindungen I-li.394 (Beispiel 16), I-lu.394 (Beispiel 15) und I-lv.394 (Beispiel 18) hergestellt.

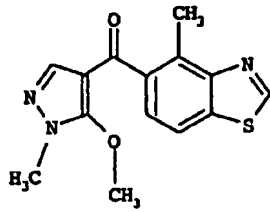
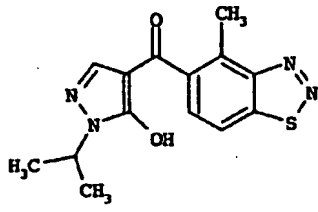
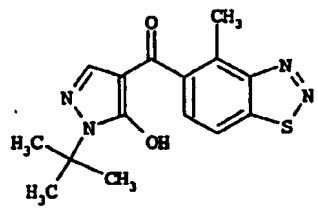
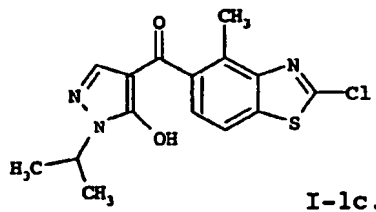
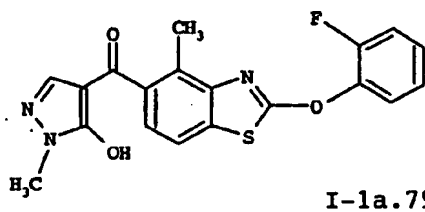
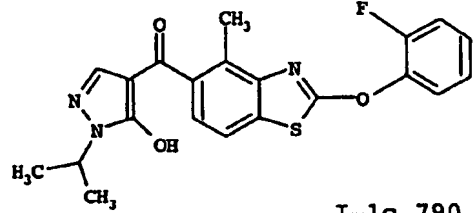
164

Die Verbindungen der Beispiele 7 bis 12, 14, 17 und 19 bis 52 wurden analog der in Beispiel 1, Schritte 1.10 und 1.11 beschriebenen Sequenz durch Umsetzung der jeweiligen Carbonsäure IVb mit dem entsprechenden 5-Hydroxypyrazol III hergestellt.

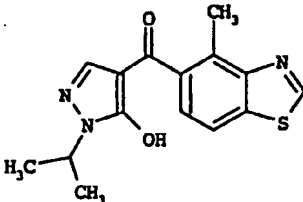
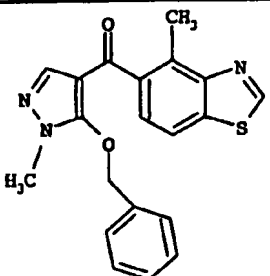
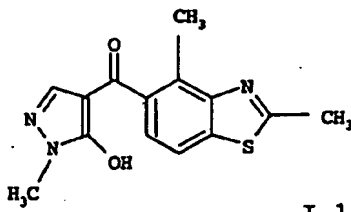
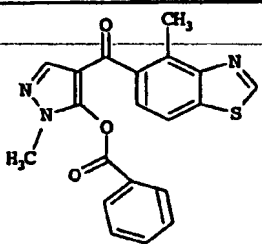
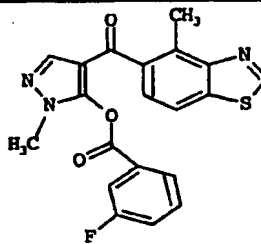
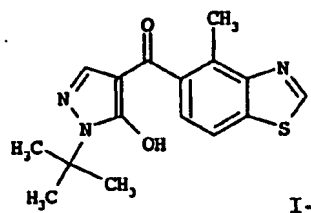
5

10	Bsp.	Struktur / Verbindung-Nr.	Smp. [°C] oder ¹ H-NMR [ppm]
15	1	 I-1a.394	149-150 °C
20	2	 I-1a.396	135-137 °C
25	3	 I-4a.2	207-209 °C
35	4	 I-1a.447	---
40	5	 I-4a.38	CDCl ₃ , TMS: 3.78 (s, 3H), 4.39 (s, 3H), 4.75 (OH), 7.63 (d, 1H), 7.86 (s, 1H), 8.08 (d, 1H), 8.56 (s, 1H) ppm.
45			

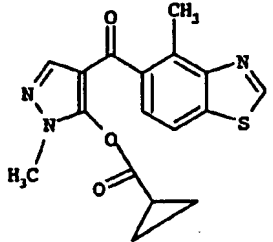
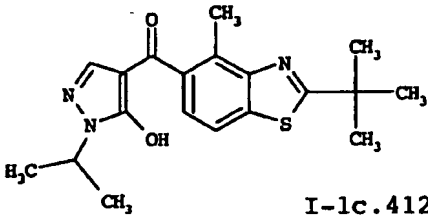
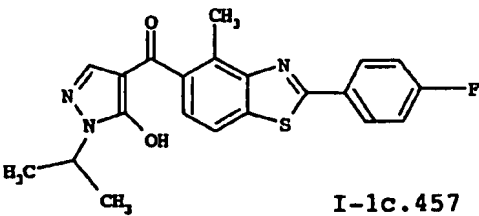
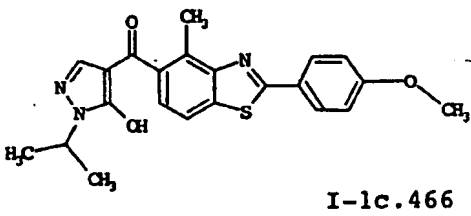
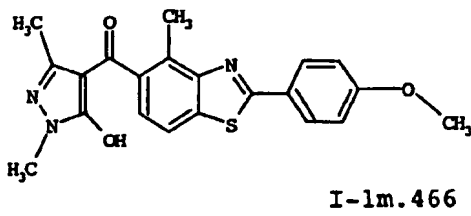
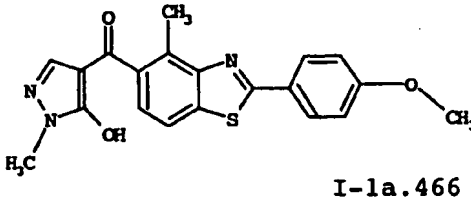
165

5	6	 I-1e.394	138-141 °C
10	7	 I-4c.2	141-143 °C
15	8	 I-4d.2	122-125 °C
20	9	 I-1c.396	118-122 °C
25	10	 I-1a.790	CDCl ₃ , TMS: 2.6 (s, 3H), 3.78 (s, 3H), 5,5 (OH), 7.2 - 7.38 (m, 3H), 7.4 - 7.55 (m, 3H), 7.6 (d, 1H) ppm.
30	11	 I-1c.790	CDCl ₃ , TMS: 1.55 (d, 6H), 2.62 (s, 3H), 4.6 (m, 1H), 5,5 (OH), 7.2 - 7.38 (m, 3H), 7.4 - 7.55 (m, 3H), 7.6 (d, 1H) ppm.

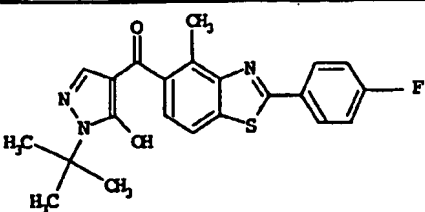
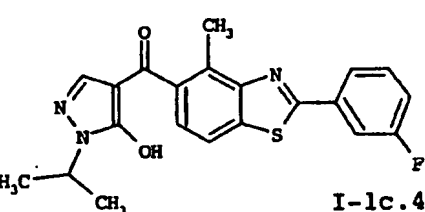
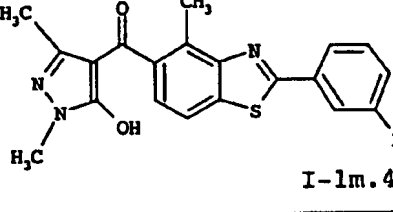
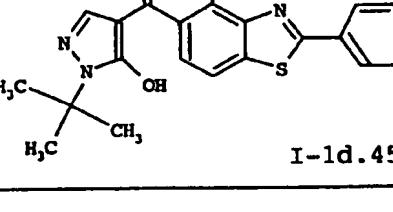
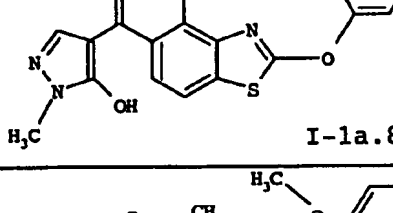
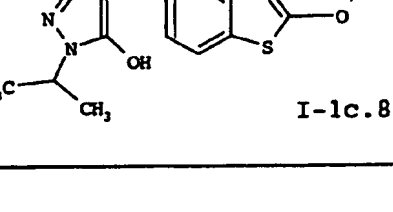
166

5	12	 I-1c.394	135-137 °C
10	13	 I-1g.394	CDCl ₃ , TMS: 2.81 (s, 3H), 3.79 (s, 3H), 5.2 (s, 2H) 7.08 (d, 1H), 7.2 - 7.45 (m, 6H), 7.65 (d, 1H), 9.1 (s, 1H) ppm.
15	14	 I-1a.405	148-152 °C
20	15	 I-1u.394	CDCl ₃ , TMS: 2.78 (s, 3H), 3.78 (s, 3H), 7.25 - 7.55 (m, 4H), 7.65 (d, 1H), 7.8 - 7.9 (m, 3H), 8.9 (s, 1H) ppm.
25	16	 I-1i.394	CDCl ₃ , TMS: 2.78 (s, 3H), 3.78 (s, 3H), 7.2 - 7.38 (m, 3H), 7.58 (d, 1H), 7.67 - 7.78 (m, 2H), 7.82 (s, 1H), 8.99 (s, 1H) ppm.
30	17	 I-1d.394	98-101 °C
35			
40			
45			

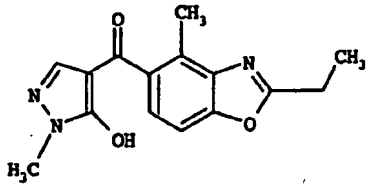
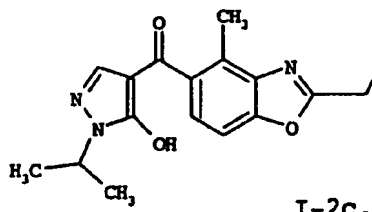
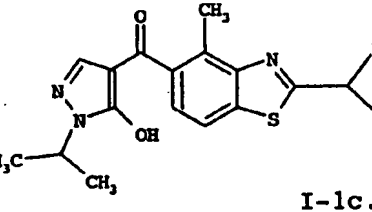
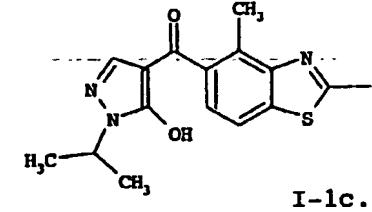
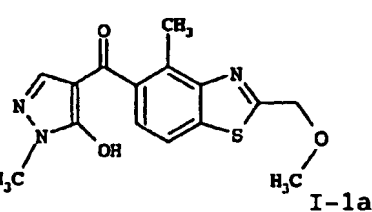
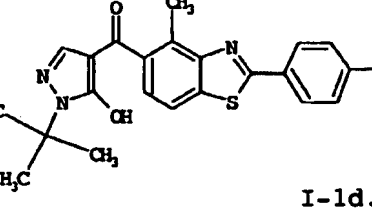
167

5	18	 <p>I-lv.394</p>	CDCl ₃ , TMS: 0.8 (m, 2H), 1.05 (m, 2H), 1.66 (m, 1H), 2.8 (s, 3H), 3.75 (s, 3H), 5.6 (OH), 7.45 (d, 1H), 7.8 (s, 1H), 7.82 (d, 1H), 9.03 (s, 1H) ppm.
10	19	 <p>I-lc.412</p>	145-148 °C
15	20	 <p>I-lc.457</p>	CDCl ₃ , TMS: 1.58 (d, 6H), 2.90 (s, 3H), 4.62 (m, 1H), 7.2 (m, 2H), 7.48 (s, 1H), 7.54 (d, 1H), 7.8 (d, 1H), 8.14 (m, 2H) ppm.
20	21	 <p>I-lc.466</p>	CDCl ₃ , TMS: 1.56 (d, 6H), 2.92 (s, 3H), 3.9 (s, 3H), 4.62 (m, 1H), 7.02 (d, 2H), 7.46 (s, 1H), 7.5 (d, 1H), 7.80 (d, 1H), 8.08 (d, 2H) ppm.
25	22	 <p>I-lm.466</p>	CDCl ₃ , TMS: 1.72 (s, 3H), 2.88 (s, 3H), 3.64 (s, 3H), 3.88 (s, 3H), 7.0 (m, 2H), 7.22 (d, 1H), 7.78 (d, 1H), 8.06 (d, 2H) ppm.
30	23	 <p>I-la.466</p>	204-205 °C
35			
40			
45			

168

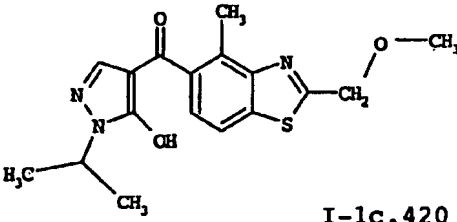
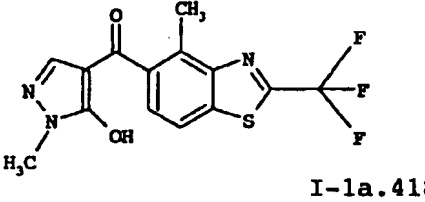
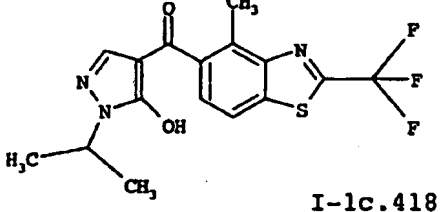
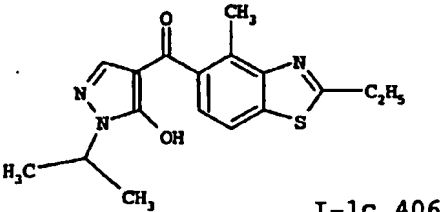
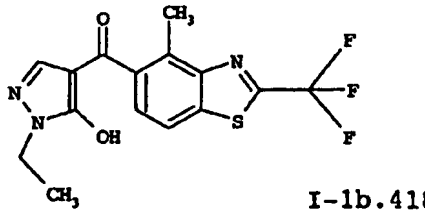
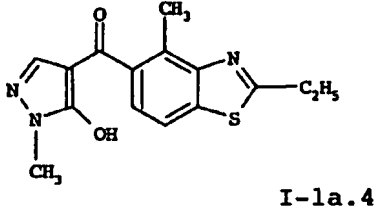
5	24	 I-1d.457	CDCl ₃ , TMS: 1.64 (s, 9H), 2.92 (s, 3H), 7.20 (m, 2H), 7.48 (s, 1H), 7.62 (d, 1H), 7.82 (d, 1H), 8.16 (m, 2H) ppm.
10	25	 I-1c.456	127-128 °C
15	26	 I-1m.456	123-127 °C
20	27	 I-1d.456	153-154 °C
25	28	 I-1a.802	CDCl ₃ , TMS: 2.78 (s, 3H), 3.78 (s, 3H), 3.88 (s, 3H), 7.0 - 7.12 (m, 2H), 7.2 - 7.4 (m, 4H), 7.46 (d, 1H), 8.85 (OH) ppm.
30	29	 I-1c.802	CDCl ₃ , TMS: 1.61 (d, 6H), 2.80 (s, 3H), 3.90 (s, 3H), 4.63 (m, 1H), 7.0 - 7.12 (m, 2H), 7.25 - 7.48 (m, 4H), 7.55 (d, 1H), 8.95 (OH) ppm.
35			
40			

169

5	30	 I-2a.406	134-137 °C
10	31	 I-2c.406	CDCl ₃ , TMS: 1.53 (t, 3H), 1.55 (d, 6H), 2.78 (s, 3H), 3.03 (q, 2H), 4.62 (m, 1H), 7.38 (d, 1H), 7.42 (s, 1H), 7.53 (d, 1H) ppm.
15	32	 I-1c.408	102-105 °C
20	33	 I-1c.405	107-110 °C
25	34	 I-1a.420	CDCl ₃ , TMS: 2.82 (s, 3H), 3.58 (s, 3H), 3.70 (s, 3H), 4.88 (s, 2H); 7.42 (s, 1H), 7.52 (d, 1H), 7.82 (d, 1H), 7.90 (OH) ppm.
30	35	 I-1d.475	197-200 °C

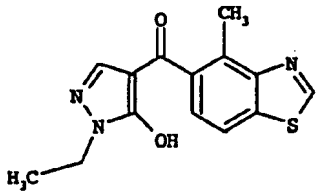
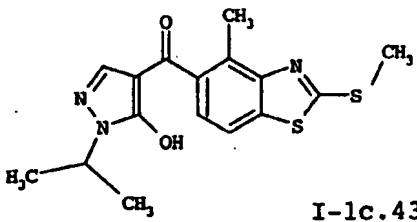
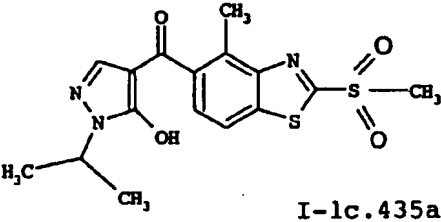
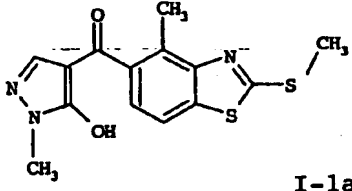
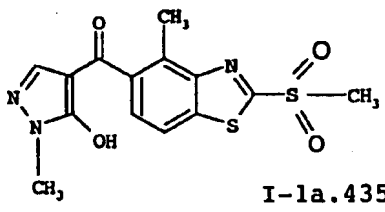
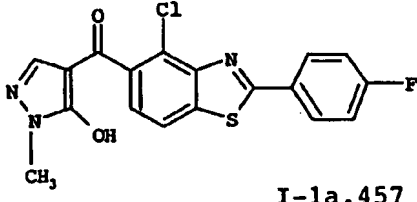
45

170

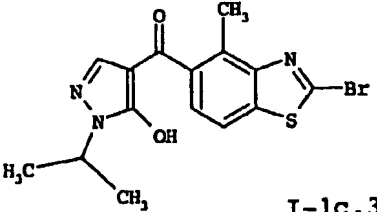
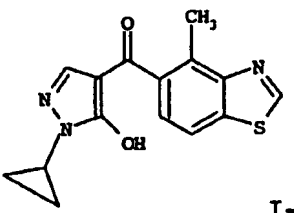
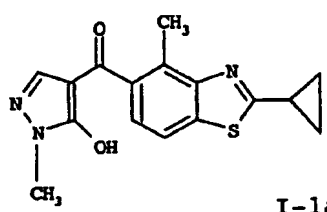
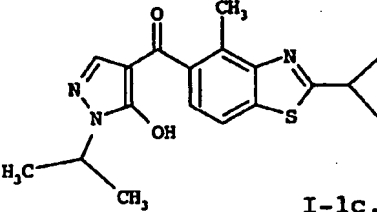
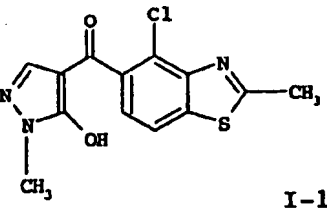
5	36	 I-1c.420	100-104 °C
10	37	 I-1a.418	108-112 °C
15	38	 I-1c.418	84-87 °C
20	39	 I-1c.406	105-107 °C
25	40	 I-1b.418	81-85 °C
30	41	 I-1a.406	125-128 °C

45

171

5	42	 I-1b.394	105-110 °C
10	43	 I-1c.435	139-143 °C
15	44	 I-1c.435a	172-177 °C
20	45	 I-1a.435	138-144 °C
25	46	 I-1a.435a	208-210 °C
30	47	 I-1a.457	235-236 °C
35			
40			
45			

172

5	48	 I-1c.397	CDCl ₃ , TMS: 1.55 (d, 6H), 2.82 (s, 3H), 4.61 (m, 1H), 7.39 (s, 1H), 7.56 (d, 1H), 7.77 (d, 1H) ppm.
10	49	 I-1w.394	CDCl ₃ , TMS: 1.08 (m, 2H), 1.22 (m, 2H), 2.90 (s, 3H), 3.40 (m, 1H), 7.38 (s, 1H), 7.56 (d, 1H), 7.90 (d, 1H), 8.95 (OH), 9.03 (s, 1H) ppm.
20	50	 I-1a.808	69-71 °C
25	51	 I-1c.808	115-118 °C
30	52	 I-1a.667	141-144 °C

40

45

173

Die Verbindungen der Formel I und deren landwirtschaftlich brauchbaren Salze eignen sich sowohl als Isomerengemische als auch in Form der reinen Isomeren - als Herbizide. Die herbiziden Mittel, die Verbindungen der Formel I enthalten, bekämpfen Pflanzenwuchs auf Nichtkulturflächen sehr gut, besonders bei hohen Aufwandmengen. In Kulturen wie Weizen, Reis, Mais, Soja und Baumwolle wirken sie gegen Unkräuter und Schadgräser, ohne die Kulturpflanzen nennenswert zu schädigen. Dieser Effekt tritt vor allem bei niedrigen Aufwandmengen auf.

10

In Abhängigkeit von der jeweiligen Applikationsmethode können die Verbindungen der Formel I bzw. sie enthaltenden herbiziden Mittel noch in einer weiteren Zahl von Kulturpflanzen zur Beseitigung unerwünschter Pflanzen eingesetzt werden. In Betracht kommen

15 beispielsweise folgende Kulturen:

- Allium cepa, Ananas comosus, Arachis hypogaea, Asparagus officinalis, Beta vulgaris spec. altissima, Beta vulgaris spec. rapa, Brassica napus var. napus, Brassica napus var. napobrassica, Brassica rapa var. silvestris, Camellia sinensis, Carthamus tinctorius, Carya illinoensis, Citrus limon, Citrus sinensis, Coffea arabica (Coffea canephora, Coffea liberica), Cucumis sativus, Cynodon dactylon, Daucus carota, Elaeis guineensis, Fragaria vesca, Glycine max, Gossypium hirsutum, Gossypium arboreum, Gossypium herbaceum, Gossypium vitifolium, Helianthus annuus, Hevea brasiliensis, Hordeum vulgare, Humulus lupulus, Ipomoea batatas, Juglans regia, Lens culinaris, Linum usitatissimum, Lycopersicon lycopersicum, Malus spec., Manihot esculenta, Medicago sativa, Musa spec., Nicotiana tabacum (N.rustica), Olea europaea, Oryza sativa, Phaseolus lunatus, Phaseolus vulgaris, Picea abies, Pinus spec., Pisum sativum, Prunus avium, Prunus persica, Pyrus communis, Ribes sylvestre, Ricinus communis, Saccharum officinarum, Secale cereale, Solanum tuberosum, Sorghum bicolor (s. vulgare), Theobroma cacao, Trifolium pratense, Triticum aestivum, Triticum durum, Vicia faba, Vitis vinifera und Zea mays.

Darüber hinaus können die Verbindungen der Formel I auch in Kulturen, die durch Züchtung einschließlich gentechnischer Methoden gegen die Wirkung von Herbiziden tolerant sind, verwandt werden.

Die Verbindungen der Formel I bzw. die sie enthaltenden herbiziden Mittel können beispielsweise in Form von direkt versprühbaren wässrigen Lösungen, Pulvern, Suspensionen, auch hochprozentigen wässrigen, öligen oder sonstigen Suspensionen oder Dispersionen, Emulsionen, Öldispersionen, Pasten, Stäubemitteln, Streumitteln oder Granulaten durch Versprühen, Vernebeln, Ver-

174

stäuben, Verstreuen oder Gießen angewendet werden. Die Anwendungsformen richten sich nach den Verwendungszwecken; sie sollten in jedem Fall möglichst die feinste Verteilung der erfindungsgemäßen Wirkstoffe gewährleisten.

5

Die herbiziden Mittel enthalten eine herbizid wirksame Menge mindestens einer Verbindung der Formel I oder eines landwirtschaftlich brauchbaren Salzes von I und in der Regel die für die Formulierung von Pflanzenschutzmitteln üblichen Hilfsmittel.

10

Als inerte Hilfsstoffe kommen im Wesentlichen in Betracht:

Mineralölfraktionen von mittlerem bis hohem Siedepunkt wie Kerosin und Dieselöl, ferner Kohlenteeröle sowie Öle pflanzlichen
15 oder tierischen Ursprungs, aliphatische, cyclische und aromatische Kohlenwasserstoffe, z.B. Paraffin, Tetrahydronaphthalin, alkylierte Naphthaline und deren Derivate, alkylierte Benzole oder deren Derivate, Alkohole wie Methanol, Ethanol, Propanol, Butanol und Cyclohexanol, Ketone wie Cyclohexanon, stark polare
20 Lösungsmittel, z.B. Amine wie N-Methylpyrrolidon und Wasser.

Wäßrige Anwendungsformen können aus Emulsionskonzentraten, Suspensionen, Pasten, netzbaren Pulvern oder wasserdispergierbaren Granulaten durch Zusatz von Wasser bereitet werden. Zur Her-
25 stellung von Emulsionen, Pasten oder Öldispersionen können die Verbindungen der Formel I als solche oder in einem Öl oder Lösungsmittel gelöst, mittels Netz-, Haft-, Dispergier- oder Emulgiermittel in Wasser homogenisiert werden. Es können aber
auch aus wirksamer Substanz, Netz-, Haft-, Dispergier- oder
30 Emulgiermittel und eventuell Lösungsmittel oder Öl bestehende Konzentrate hergestellt werden, die zur Verdünnung mit Wasser geeignet sind.

Als oberflächenaktive Stoffe kommen die Alkali-, Erdalkali-,
35 Ammoniumsalze von aromatischen Sulfonsäuren, z.B. Lignin-, Phenol-, Naphthalin- und Dibutyl-naphthalinsulfonsäure, sowie von Fettsäuren, Alkyl- und Alkylarylsulfonaten, Alkyl-, Laurylether- und Fettalkoholsulfaten, sowie Salze sulfatierter Hexa-, Hepta- und Octadecanolen sowie von Fettalkoholglykoether, Kondensati-
40 onsprodukte von sulfoniertem Naphthalin und seiner Derivate mit Formaldehyd, Kondensationsprodukte des Naphthalins bzw. der Naphthalinsulfonsäuren mit Phenol und Formaldehyd, Polyoxy-ethylenoctylphenolether, ethoxyliertes Isooctyl-, Octyl- oder Nonylphenol, Alkylphenyl-, Tributylphenylpolyglykoether, Alkyl-
45 arylpolyetheralkohole, Isotridecylalkohol, Fettalkoholethylenoxid-Kondensate, ethoxyliertes Rizinusöl, Polyoxyethylen- oder Polyoxypropylenalkylether, Laurylalkoholpolyglykoetheracetat,

175

Sorbitester, Lignin-Sulfitablaugen oder Methylcellulose in Betracht.

Pulver-, Streu- und Stäubemittel können durch Mischen oder ge-
5 meinsames Vermahlen der wirksamen Substanzen mit einem festen Trägerstoff hergestellt werden.

Granulate, z.B. Umhüllungs-, Imprägnierungs- und Homogengranulate können durch Bindung der Wirkstoffe an feste Trägerstoffe her-
10 gestellt werden. Feste Trägerstoffe sind Mineralerden wie Kieselsäuren, Kieselgele, Silikate, Talkum, Kaolin, Kalkstein, Kalk, Kreide, Bolus, Löß, Ton, Dolomit, Diatomeenerde, Calcium- und Magnesiumsulfat, Magnesiumoxid, gemahlene Kunststoffe, Düngemittel, wie Ammoniumsulfat, Ammoniumphosphat, Ammoniumnitrat,
15 Harnstoffe und pflanzliche Produkte wie Getreidemehl, Baumrin- den-, Holz- und Nußschalenmehl, Cellulosepulver oder andere feste Trägerstoffe.

Die Konzentrationen der Verbindungen der Formel I in den
20 anwendungsfertigen Zubereitungen können in weiten Bereichen variiert werden. Im allgemeinen enthalten die Formulierungen etwa von 0,001 bis 98 Gew.-%, vorzugsweise 0,01 bis 95 Gew.-%, mindestens eines Wirkstoffs. Die Wirkstoffe werden dabei in einer Reinheit von 90% bis 100%, vorzugsweise 95% bis 100% (nach NMR-
25 Spektrum) eingesetzt.

Die folgenden Formulierungsbeispiele verdeutlichen die Herstellung solcher Zubereitungen:

30 I. 20 Gewichtsteile der jeweiligen Verbindung der Formel I werden in einer Mischung gelöst, die aus 80 Gewichtsteilen alkyliertem Benzol, 10 Gewichtsteilen des Anlagerungsproduktes von 8 bis 10 Mol Ethylenoxid an 1 Mol Ölsäure-N-mo-
35 noethanolamid, 5 Gewichtsteilen Calciumsalz der Dodecylbenzolsulfonsäure und 5 Gewichtsteilen des Anlagerungsproduktes von 40 Mol Ethylenoxid an 1 Mol Rizinusöl besteht. Durch Ausgießen und feines Verteilen der Lösung in 100000 Gewichtsteilen Wasser erhält man eine wäßrige Dispersion, die 0,02 Gew.-% des Wirkstoffs enthält.

40 II. 20 Gewichtsteile der jeweiligen Verbindung der Formel I werden in einer Mischung gelöst, die aus 40 Gewichtsteilen Cyclohexanon, 30 Gewichtsteilen Isobutanol, 20 Gewichts-
45 teilen des Anlagerungsproduktes von 7 Mol Ethylenoxid an 1 Mol Isooctylphenol und 10 Gewichtsteilen des Anlagerungsproduktes von 40 Mol Ethylenoxid an 1 Mol Rizinusöl besteht. Durch Eingießen und feines Verteilen der Lösung in

176

100000 Gewichtsteilen Wasser erhält man eine wäßrige Dispersion, die 0,02 Gew.-% des Wirkstoffs enthält.

- III. 20 Gewichtsteile der jeweiligen Verbindung der Formel I
5 werden in einer Mischung gelöst, die aus 25 Gewichtsteilen Cyclohexanon, 65 Gewichtsteilen einer Mineralölfraktion vom Siedepunkt 210 bis 280°C und 10 Gewichtsteilen des Anlagerungsproduktes von 40 Mol Ethylenoxid an 1 Mol Ricinusöl besteht. Durch Eingießen und feines Verteilen der Lösung in
10 100000 Gewichtsteilen Wasser erhält man eine wäßrige Dispersion, die 0,02 Gew.-% des Wirkstoffs enthält.
- IV. 20 Gewichtsteile der jeweiligen Verbindung der Formel I
werden mit 3 Gewichtsteilen des Natriumsalzes der Diisobutyl-naphthalinsulfonsäure, 17 Gewichtsteilen des Natriumsalzes einer Ligninsulfonsäure aus einer Sulfit-Ablauge und
15 60 Gewichtsteilen pulverförmigem Kieselsäuregel gut vermischt und in einer Hammermühle vermahlen. Durch feines Verteilen der Mischung in 20000 Gewichtsteilen Wasser erhält man eine Spritzbrühe, die 0,1 Gew.-% des Wirkstoffs
20 enthält.
- V. 3 Gewichtsteile der jeweiligen Verbindung der Formel I werden mit 97 Gewichtsteilen feinteiligem Kaolin vermischt.
25 Man erhält auf diese Weise ein Stäubemittel, das 3 Gew.-% des Wirkstoffs enthält.
- VI. 20 Gewichtsteile der jeweiligen Verbindung der Formel I
werden mit 2 Gewichtsteilen Calciumsalz der Dodecylbenzolsulfonsäure, 8 Gewichtsteilen Fettalkoholpolyglykoether, 2
30 Gewichtsteilen Natriumsalz eines Phenol-Harnstoff-Formaldehyd-Kondensates und 68 Gewichtsteilen eines paraffinischen Mineralöls innig vermischt. Man erhält eine stabile ölige Dispersion.
- 35 VII. 1 Gewichtsteil der jeweiligen Verbindung der Formel I wird in einer Mischung gelöst, die aus 70 Gewichtsteilen Cyclohexanon, 20 Gewichtsteilen ethoxyliertem Isooctylphenol und
10 Gewichtsteilen ethoxyliertem Rizinusöl besteht. Man erhält ein stabiles Emulsionskonzentrat.
40
- VIII. 1 Gewichtsteil der jeweiligen Verbindung der Formel I wird in einer Mischung gelöst, die aus 80 Gewichtsteilen Cyclohexanon und 20 Gewichtsteilen Wettol^R EM 31 (= nicht-ionischer Emulgator auf der Basis von ethoxyliertem Rizinusöl) besteht. Man erhält ein stabiles Emulsionskonzentrat.
45

177

Die Applikation der Verbindungen der Formel I bzw. der herbiziden Mittel kann im Vorauf- oder im Nachaufverfahren erfolgen. Sind die Wirkstoffe für gewisse Kulturpflanzen weniger verträglich, so können Ausbringungstechniken angewandt werden, bei
5 welchen die herbiziden Mittel mit Hilfe der Spritzgeräte so gespritzt werden, daß die Blätter der empfindlichen Kulturpflanzen nach Möglichkeit nicht getroffen werden, während die Wirkstoffe auf die Blätter darunter wachsender unerwünschter Pflanzen oder die unbedeckte Bodenfläche gelangen (post-directed,
10 lay-by).

Die Aufwandmengen an Verbindung der Formel I betragen je nach Bekämpfungsziel, Jahreszeit, Zielpflanzen und Wachstumsstadium 0,001 bis 3,0 vorzugsweise 0,01 bis 1,0 kg/ha aktive Substanz
15 (a.S.).

Zur Verbreiterung des Wirkungsspektrums und zur Erzielung synergistischer Effekte können die erfindungsgemäßen Verbindungen der Formel I mit zahlreichen Vertretern anderer herbizider oder
20 wachstumsregulierender Wirkstoffgruppen gemischt und gemeinsam ausgebracht werden. Beispielsweise kommen als Mischungspartner 1,2,4-Thiadiazole, 1,3,4-Thiadiazole, Amide, Aminophosphorsäure und deren Derivate, Aminotriazole, Anilide, Aryloxy-/Heteroaryl-oxyalkansäuren und deren Derivate, Benzoessäure und deren
25 Derivate, Benzothiadiazinone, 2-Aroyl-1,3-cyclohexandione, Heteroaryl-Aryl-Ketone, Benzylisoxazolidinone, meta-CF₃-Phenyl-derivate, Carbamate, Chinolincarbonsäure und deren Derivate, Chloracetanilide, Cyclohexan-1,3-dion-Derivate, Cyclohexenonoximetherderivate, Diazine, Dichlorpropionsäure und deren Derivate,
30 Dihydrobenzofurane, Dihydrofuran-3-one, Dinitroaniline, Dinitrophenole, Diphenylether, Dipyridyle, Halogencarbonsäuren und deren Derivate, Harnstoffe, 3-Phenyluracile, Imidazole, Imidazolinone, N-Phenyl-3,4,5,6-tetrahydrophthalimide, Oxadiazole, Oxirane, Phenole, Aryloxy- und Heteroaryloxyphenoxypropionsäureester,
35 Phenylelessigsäure und deren Derivate, 2-Phenylpropionsäure und deren Derivate, Pyrazole, Phenylpyrazole, Pyridazine, Pyridincarbonsäure und deren Derivate, Pyrimidylether, Sulfonamide, Sulfonylharnstoffe, Triazine, Triazinone, Triazolinone, Triazolcarboxamide und Uracile in Betracht.

40

Außerdem kann es von Nutzen sein, die Verbindungen der Formel I allein oder in Kombination mit anderen Herbiziden auch noch mit weiteren Pflanzenschutzmitteln gemischt, gemeinsam auszubringen, beispielsweise mit Mitteln zur Bekämpfung von Schädlingen oder
45 phytopathogenen Pilzen bzw. Bakterien. Von Interesse ist ferner die Mischbarkeit mit Mineralsalzlösungen, welche zur Behebung von Ernährungs- und Spurenelementmängeln eingesetzt werden. Es können

178

auch nichtphytotoxische Öle und Ölkonzentrate zugesetzt werden.

Anwendungsbeispiele

- 5 Die herbizide Wirkung der erfindungsgemäßen Verbindungen der Formel I ließ sich durch die folgenden Gewächshausversuche zeigen:

Als Kulturgefäße dienten Plastikblumentöpfe mit lehmigem Sand mit etwa 3,0 % Humus als Substrat. Die Samen der Testpflanzen wurden
10 nach Arten getrennt eingesät.

Bei Voraufaufbehandlung wurden die in Wasser suspendierten oder emulgierten Wirkstoffe direkt nach Einsaat mittels fein verteilender Düsen aufgebracht. Die Gefäße wurden leicht beregnet, um
15 Keimung und Wachstum zu fördern, und anschließend mit durchsichtigen Plastikhauben abgedeckt, bis die Pflanzen angewachsen waren. Diese Abdeckung bewirkt ein gleichmäßiges Keimen der Testpflanzen, sofern dies nicht durch die Wirkstoffe beeinträchtigt wurde.

20

Zum Zweck der Nachaufaufbehandlung wurden die Testpflanzen je nach Wuchsform erst bis zu einer Wuchshöhe von 3 bis 15 cm angezogen und erst dann mit den in Wasser suspendierten oder emulgierten Wirkstoffen behandelt. Die Testpflanzen wurden dafür entweder

~~25 direkt gesät und in den gleichen Gefäßen aufgezogen oder sie wurden~~
erst als Keimpflanzen getrennt angezogen und einige Tage vor der Behandlung in die Versuchsgefäße verpflanzt. Die Aufwandmenge für die Nachaufaufbehandlung betrug 0,5 bzw. 0,25 kg/ha a.S. (aktive Substanz).

30

Die Pflanzen wurden artenspezifisch bei Temperaturen von 10 bis 25°C bzw. 20 bis 35°C gehalten. Die Versuchsperiode erstreckte sich über 2 bis 4 Wochen. Während dieser Zeit wurden die Pflanzen gepflegt, und ihre Reaktion auf die einzelnen Behandlungen wurde

35 ausgewertet.

Bewertet wurde nach einer Skala von 0 bis 100. Dabei bedeutet 100 kein Aufgang der Pflanzen bzw. völlige Zerstörung zumindest der oberirdischen Teile und 0 keine Schädigung oder normaler

40 Wachstumsverlauf.

Die in den Gewächshausversuchen verwendeten Pflanzen setzten sich aus folgenden Arten zusammen:

45

179

	Bayercode	Deutscher Name	Englischer Name
	AMARE	Zurückgekrümmter Fuchsschwanz	redroot pigweed
5	AVEFA	Flughafener	wild oats
	CHEAL	Weißer Gänsefuß	lambquarters (goosefoot)
	CAPBP	Hirtentäschelkraut	shepherd's purse
	DIGSA	Blutfingerhirse	Fingergrass, hairy
10	ECHCG	Hühnerhirse	barnyardgrass
	EPHHL	Wolfsmilchart	spurge
	GASPA	Knopfkraut	smallflower
	GALAP	Klettenlabkraut	catchweed bedstraw
15	LAMAM	Taubnessel, stengelumfassende	henbit
	MYOAR	Vergißmeinnicht	forget-me-not
	PAPRH	Klatschmohn	corn poppy
20	POLPE	Flohknöterich	lady's thumb
	SETIT	Borstenhirse	foxtail
	STEME	Vogelsternmiere	Common chickweed
	SOLNI	Schwarzer Nachtschatten	black nightshade
25	THLAR	Hellerkraut	fanweed
	TRZAS	Sommer Weizen	spring wheat

Bei Aufwandmengen von 0,5 bzw. 0,25 kg/ha (a.S.) zeigte die Verbindung 4-(4'-Methylbenzothiazol-5'-ylcarbonyl)-5-hydroxy-1-methylpyrazol (Beispiel 1) im Nachauflauf eine sehr gute herbizide Wirkung gegen die Schädipflanzen AVEFA, CHEAL, POLPE, SOLNI und GALAP.

Bei Aufwandmengen von 0,125 bzw. 0,0625 kg/ha zeigt die Verbindung 4-(2',4'-Dimethylbenzothiazol-5'-ylcarbonyl)-5-hydroxy-1-methylpyrazol (Beispiel 14) im Nachauflauf eine sehr gute herbizide Wirkung gegen GASPA, LAMAM, STEME, THLAR.

Bei Aufwandmengen von 0,125 bzw. 0,0625 kg/ha zeigt die Verbindung 4-(4'-Methylbenzothiazol-5'-ylcarbonyl)-5-benzyloxy-1-methylpyrazol (Beispiel 13) im Nachauflauf eine sehr gute herbizide Wirkung gegen CHEAL, EPHHL, MYOAR, PAPRH, SOLNI bei Selektivität in Weizen.

Bei Aufwandmengen von 0,25 bzw. 0,125 kg/ha zeigt die Verbindung 4-(2'-Ethyl-4'-methylbenzoxazol-5'-ylcarbonyl)-5-hydroxy-1-iso-

180

propylpyrazol (Beispiel 31) im Nachauflauf eine sehr gute herbizide Wirkung gegen AMARE, CHEAL, LAMAM, PAPRH, POLPE, THLAR.

Bei Aufwandmengen von 0,25 bzw. 0,125 kg/ha zeigt die Verbindung
5 4-(2',4'-Dimethylbenzothiazol-5'-ylcarbonyl)-5-hydroxy-1-isopropylpyrazol (Beispiel 33) im Nachauflauf eine sehr gute herbizide Wirkung gegen AMARE, CHEAL, LAMAM, MYOAR, PAPRH, THLAR.

Bei Aufwandmengen von 0,25 bzw. 0,125 kg/ha zeigt die Verbindung
10 4-(2'-Methoxymethyl-4'-methylbenzothiazol-5'-ylcarbonyl)-5-hydroxy-1-methylpyrazol (Beispiel 34) im Nachauflauf eine sehr gute herbizide Wirkung gegen CHEAL, LAMAM, PAPRH, STEME, THLAR.

Bei Aufwandmengen von 0,25 bzw. 0,125 kg/ha zeigt die Verbindung
15 4-(2'-Ethyl-4'-methylbenzoxazol-5'-ylcarbonyl)-5-hydroxy-1-methylpyrazol (Beispiel 30) im Nachauflauf eine sehr gute herbizide Wirkung gegen CHEAL, LAMAM, PAPRH, POLPE, THLAR.

Bei Aufwandmengen von 0,25 bzw. 0,125 kg/ha zeigt die Verbindung
20 4-(2'-Methoxymethyl-4'-methylbenzothiazol-5'-ylcarbonyl)-5-hydroxy-1-isopropylpyrazol (Beispiel 36) im Nachauflauf eine sehr gute herbizide Wirkung gegen CHEAL, EPHHL, MYOAR, PAPRH, SOLNI, STEME.

~~25 Bei Aufwandmengen von 0,25 bzw. 0,125 kg/ha zeigt die Verbindung
4-(4'-Methylbenzothiazol-5'-ylcarbonyl)-5-hydroxy-1-isopropylpyrazol (Beispiel 12) im Nachauflauf eine sehr gute herbizide Wirkung gegen CHEAL, LAMAM, PAPRH, STEME, THLAR.~~

30 Bei Aufwandmengen von 0,5 bzw. 0,25 kg/ha zeigt die Verbindung
4-(4'-Methylbenzothiazol-5'-ylcarbonyl)-5-(3''-fluorbenzoyl)-oxy-1-methylpyrazol (Beispiel 16) im Nachauflauf eine sehr gute herbizide Wirkung gegen AMARE, ECHCG, CHEAL, GALAP, POLPE.

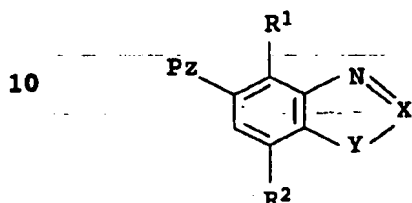
35 Bei Aufwandmengen von 0,25 bzw. 0,125 kg/ha zeigt die Verbindung
4-(4'-Methylbenzothiazol-5'-ylcarbonyl)-5-benzoyloxy-1-methylpyrazol (Beispiel 15) im Nachauflauf eine sehr gute herbizide Wirkung gegen AVEFA, AMARE, ECHCG, CHEAL, POLPE.

40 Bei Aufwandmengen von 0,25 bzw. 0,125 kg/ha zeigt die Verbindung
4-(4'-Methylbenzothiazol-5'-ylcarbonyl)-5-cyclopropylcarbonyloxy-1-methylpyrazol (Beispiel 18) im Nachauflauf eine sehr gute herbizide Wirkung gegen AVEFA, AMARE, ECHCG, CHEAL, POLPE.

181

Patentansprüche

- 5 1. Pyrazolyl-Derivate benzokondensierter, ungesättigter 5-Ring-Stickstoffheterocyclen der allgemeinen Formel I,



15

worin

20 X für N oder eine Gruppe C-R³ steht;

Y für O, S, SO, SO₂ oder NR⁴ steht

oder

25 X-Y für S=N stehen, und X Schwefel bedeutet;

R¹ Wasserstoff, Nitro, Halogen, Cyano, C₁-C₆-Alkyl,
C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Halogenalkoxy,
C₁-C₆-Alkylthio, C₁-C₆-Halogenalkylthio,
30 C₁-C₆-Alkylsulfinyl, C₁-C₆-Halogenalkylsulfinyl,
C₁-C₆-Alkylsulfonyl, C₁-C₆-Halogenalkylsulfonyl,
Aminosulfonyl, C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-alkyl,
C₁-C₆-Alkylthio-C₁-C₆-alkyl,
C₁-C₆-Alkylsulfinyl-C₁-C₆-alkyl,
35 C₁-C₆-Alkylsulfonyl-C₁-C₆-alkyl,
C₁-C₆-Alkylamino-C₁-C₆-alkyl, oder
Di-(C₁-C₆-alkyl)amino-C₁-C₆-alkyl;

R² Wasserstoff, Halogen oder C₁-C₆-Alkyl;

40

R³ Wasserstoff, Halogen, Nitro, Cyano, Hydroxy, Amino,
Mercapto, Rhodano, Hydrazid, C₁-C₆-Alkyl,
C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Hydroxyalkyl, C₁-C₆-Aminoalkyl,
C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-alkyl, C₁-C₆-Alkylcarbonyl-C₁-C₆-alkyl,
45 C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Halogenalkoxy, C₁-C₆-Hydroxyalkoxy,
C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-alkoxy, C₃-C₆-Cycloalkyl,

182

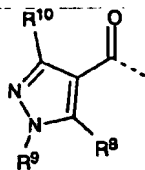
- 5 C₁-C₆-Alkylamino, Di-C₁-C₆-alkylamino,
C₃-C₆-Cycloalkylamino, wobei die Alkyl- und
Cycloalkylgruppen der drei letztgenannten Reste teilweise
oder vollständig halogeniert und/oder ein bis drei
Substituenten, ausgewählt unter C₁-C₄-Alkoxy oder Hydroxy
tragen können,
- 10 C₁-C₆-Alkylthio, C₁-C₆-Halogenalkylthio,
C₁-C₆-Hydroxyalkylthio, C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-alkylthio,
C₁-C₆-Alkylsulfonyl, C₁-C₆-Alkylsulfinyl,
- 15 Phenyl, Naphthyl, Heterocyclyl, Phenylamino, Phenoxy,
Diphenylamino, wobei die Phenyl- und Heterocyclylgruppen
der sechs letztgenannten Reste ihrerseits partiell oder
vollständig halogeniert und/oder einen, zwei oder drei
Substituenten, ausgewählt unter Nitro, Cyano, Hydroxy,
C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy und
C₁-C₄-Halogenalkoxy, tragen können,
- 20 C(O)OR⁵, oder C(O)N(R⁶)R⁷; und
- R⁴ 25 Wasserstoff, C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl,
C₁-C₆-Hydroxyalkyl, C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-alkyl,
- 30 Phenyl, Naphthyl, wobei die zwei letztgenannten Reste
ihrerseits partiell oder vollständig halogeniert und/oder
einen, zwei oder drei Substituenten, ausgewählt unter
Nitro, Cyano, Hydroxy, C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl,
C₁-C₄-Alkoxy und C₁-C₄-Halogenalkoxy, tragen können;
bedeuten, wobei
- R⁵ 35 für Wasserstoff, C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl,
C₁-C₆-Hydroxyalkyl, C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-alkyl,
- 40 Phenyl, Naphthyl oder Heterocyclyl steht, wobei die drei
letztgenannten Reste ihrerseits partiell oder vollständig
halogeniert und/oder einen, zwei oder drei Substituenten,
ausgewählt unter Nitro, Cyano, Hydroxy, C₁-C₄-Alkyl,
C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy und C₁-C₄-Halogenalkoxy,
tragen können;
- 45 R⁶, R⁷ unabhängig voneinander für Wasserstoff, C₁-C₆-Alkyl,
C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Hydroxyalkyl,
C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-alkyl,

183

Phenyl oder Naphthyl stehen, wobei die zwei
 letztgenannten Reste ihrerseits partiell oder vollständig
 halogeniert und/oder einen, zwei oder drei Substituenten,
 ausgewählt unter Nitro, Cyano, Hydroxy, C₁-C₄-Alkyl,
 5 C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy und C₁-C₄-Halogenalkoxy,
 tragen können;

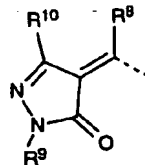
und Pz für einen Rest der Formel IIa oder IIb steht,

10



15

IIa



IIb

worin die Variablen R⁸, R⁹ und R¹⁰ folgende Bedeutung haben:

R⁸ Hydroxy, Mercapto, Halogen, OR¹¹, SR¹¹, SOR¹², SO₂R¹²,
 20 OSO₂R¹², P(O)R¹³R¹⁴, OP(O)R¹³R¹⁴, P(S)R¹³R¹⁴, OP(S)R¹³R¹⁴,
 NR¹⁵R¹⁶, ONR¹⁵R¹⁶ oder N-gebundenes Heterocyclyl, das
 partiell oder vollständig halogeniert sein kann
 und/oder einen, zwei oder drei der folgenden Reste
 tragen kann: Nitro, Cyano, C₁-C₄-Alkyl,
 25 C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy oder
 C₁-C₄-Halogenalkoxy;

R⁹ Wasserstoff, C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl, C₃-C₆-Cy-
 cloalkyl, Hydroxy, C₁-C₆-Alkoxy oder
 30 C₁-C₆-Halogenalkoxy;

R¹⁰ Wasserstoff, Halogen, C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl,
 Hydroxy, C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Halogenalkoxy,
 C₁-C₆-Alkylthio oder C₁-C₆-Halogenalkylthio; wobei

35 R¹¹ C₁-C₆-Alkyl, C₃-C₆-Alkenyl, C₃-C₆-Halogenalkenyl,
 C₃-C₆-Alkinyl, C₃-C₆-Halogenalkinyl, C₃-C₆-Cycloalkyl,
 C₁-C₆-Alkylcarbonyl, C₂-C₆-Alkenylcarbonyl,
 C₂-C₆-Alkinylcarbonyl, C₃-C₆-Cycloalkylcarbonyl,
 40 C₁-C₆-Alkoxycarbonyl, C₃-C₆-Alkenyloxy carbonyl,
 C₃-C₆-Alkinyloxy carbonyl, C₁-C₆-Alkylthiocarbonyl,
 C₁-C₆-Alkylaminocarbonyl, C₃-C₆-Alkenylaminocarbonyl,
 C₃-C₆-Alkinylaminocarbonyl,
 N,N-Di-(C₁-C₆-alkyl)-aminocarbonyl,
 45 N-(C₃-C₆-Alkenyl)-N-(C₁-C₆-alkyl)-aminocarbonyl,
 N-(C₃-C₆-Alkinyl)-N-(C₁-C₆-alkyl)-aminocarbonyl,
 N-(C₁-C₆-Alkoxy)-N-(C₁-C₆-alkyl)-aminocarbonyl,

184

- N-(C₃-C₆-Alkenyl)-N-(C₁-C₆-alkoxy)-aminocarbonyl,
 N-(C₃-C₆-Alkynyl)-N-(C₁-C₆-alkoxy)-aminocarbonyl,
 Di-(C₁-C₆-alkyl)-aminothiocarbonyl oder
 C₁-C₆-Alkoxyimino-C₁-C₆-alkyl, wobei die genannten
 5 Alkyl-, Cycloalkyl- und Alkoxyreste partiell oder
 vollständig halogeniert sein können und/oder eine bis
 drei der folgenden Gruppen tragen können: Cyano,
 C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, Di-(C₁-C₄-alkyl)-amino,
 C₁-C₄-Alkylcarbonyl, C₁-C₄-Alkoxycarbonyl,
 10 C₁-C₄-Alkoxy-C₁-C₄-alkoxycarbonyl,
 C₁-C₄-Alkylaminocarbonyl,
 Di-(C₁-C₄-alkyl)-aminocarbonyl, Aminocarbonyl,
 C₁-C₄-Alkylcarbonyloxy oder C₃-C₆-Cycloalkyl;
 15 Phenyl, Phenyl-C₁-C₆-alkyl, Phenylcarbonyl-C₁-C₆-alkyl,
 Phenylcarbonyl, Phenoxycarbonyl,
 Phenyloxythiocarbonyl, Phenylaminocarbonyl,
 N-(C₁-C₆-Alkyl)-N-(phenyl)-aminocarbonyl,
 Phenyl-C₂-C₆-alkenylcarbonyl, Heterocyclyl,
 20 Heterocyclyl-C₁-C₆-alkyl,
 Heterocyclylcarbonyl-C₁-C₆-alkyl, Heterocyclylcarbonyl,
 Heterocyclylloxycarbonyl, Heterocyclylloxythiocarbonyl,
 Heterocyclylaminocarbonyl,
 N-(C₁-C₆-Alkyl)-N-(heterocyclyl)-aminocarbonyl, oder
 25 Heterocyclyl-C₂-C₆-alkenylcarbonyl, wobei der Phenyl-
 und der Heterocyclyl-Rest der 18 letztgenannten
 Substituenten partiell oder vollständig halogeniert
 sein kann und/oder einen, zwei oder drei der folgenden
 Reste tragen kann: Nitro, Cyano, C₁-C₄-Alkyl,
 30 C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy oder
 C₁-C₄-Halogenalkoxy;
 R¹² C₁-C₆-Alkyl, C₃-C₆-Alkenyl, C₃-C₆-Alkynyl oder
 35 C₃-C₆-Cycloalkyl, wobei die vier genannten Reste
 partiell oder vollständig halogeniert sein können
 und/oder eine, zwei oder drei der folgenden Gruppen
 tragen können: Cyano, C₁-C₄-Alkoxy,
 C₁-C₄-Halogenalkoxy, C₁-C₄-Alkylthio,
 C₁-C₄-Halogenalkylthio, C₁-C₄-Alkylcarbonyl,
 40 C₁-C₄-Alkoxycarbonyl oder C₁-C₄-Halogenalkoxycarbonyl;
 Phenyl, Phenyl-C₁-C₆-alkyl, Heterocyclyl oder
 Heterocyclyl-C₁-C₆-alkyl, wobei der Phenyl- und der
 Heterocyclyl-Rest der letztgenannten Substituenten
 45 partiell oder vollständig halogeniert sein kann
 und/oder einen, zwei oder drei der folgenden Reste
 tragen kann: Nitro, Cyano, C₁-C₄-Alkyl,

185

C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkoxy
oder C₁-C₄-Alkoxycarbonyl;

5 R¹³, R¹⁴ unabhängig voneinander Wasserstoff, Hydroxy,
C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Alkylthio, Phenyl,
Phenyl-C₁-C₄-alkyl oder Phenoxy, wobei die drei
10 letztgenannten Substituenten partiell oder vollständig
halogeniert sein können und/oder einen, zwei oder drei
der folgenden Reste tragen können: Nitro, Cyano,
C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy,
C₁-C₄-Halogenalkoxy oder C₁-C₄-Alkoxycarbonyl;

15 R¹⁵ Wasserstoff, C₁-C₆-Alkyl, C₃-C₆-Alkenyl,
C₃-C₆-Halogenalkenyl, C₃-C₆-Alkinyl,
C₃-C₆-Halogenalkinyl, C₃-C₆-Cycloalkyl,
C₁-C₆-Alkylcarbonyl, Hydroxy, C₁-C₆-Alkoxy,
C₃-C₆-Alkenyloxy, C₃-C₆-Alkinyloxy, Amino,
C₁-C₆-Alkylamino, Di-(C₁-C₆-alkyl)-amino oder
20 C₁-C₆-Alkylcarbonylamino, wobei die genannten Alkyl-,
Cycloalkyl- und Alkoxyreste partiell oder vollständig
halogeniert sein können und/oder einen, zwei oder drei
der folgenden Reste tragen können: Cyano,
C₁-C₄-Alkoxycarbonyl, C₁-C₄-Alkylaminocarbonyl,
Di-(C₁-C₄-alkyl)-aminocarbonyl oder C₃-C₆-Cycloalkyl;

25 Phenyl, Phenyl-C₁-C₄-alkyl, Phenylcarbonyl,
Heterocyclyl, Heterocyclyl-C₁-C₄-alkyl oder
Heterocyclylcarbonyl, wobei der Phenyl- oder
Heterocyclyl-Rest der sechs letztgenannten
30 Substituenten partiell oder vollständig halogeniert
sein kann und/oder einen, zwei oder drei der folgenden
Reste tragen kann: Nitro, Cyano, C₁-C₄-Alkyl,
C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy oder
C₁-C₄-Halogenalkoxy; und

35 R¹⁶ Wasserstoff, C₁-C₆-Alkyl oder C₃-C₆-Alkenyl,
C₃-C₆-Alkinyl; bedeuten;

sowie deren landwirtschaftlichen brauchbaren Salze.

40 2. Pyrazolderivate gemäß Anspruch 1, worin X in Formel I für
C-R³ steht, wobei

45 R³ für Wasserstoff, Halogen, Cyano, Rhodano, C₁-C₆-Alkyl,
C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Alkoxy-C₁-C₆-al-
kyl, C₃-C₆-Cycloalkyl, C₁-C₆-Halogenalkoxy, C₁-C₆-Al-

186

kylthio, C₁-C₆-Halogenalkylthio,

Phenyl, Phenoxy oder Pyridyl, wobei die drei letztgenannten Reste teilweise oder vollständig halogeniert sein können und/oder einen der folgenden Reste:

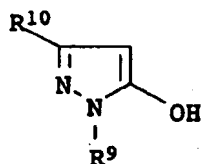
C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkyl, und C₁-C₄-Halogenalkoxy, tragen können;

oder

COOR⁵ mit den für R⁵ in Anspruch 1 angegebenen Bedeutungen steht.

3. Pyrazolderivate gemäß Anspruch 1 oder 2, worin X in Formel I für C-R³ steht und Y ausgewählt ist unter S, SO und SO₂.
4. Pyrazolderivate gemäß einem der Ansprüche 1 oder 2, worin Y in Formel I für N-R⁴ mit der für R⁴ in Anspruch 1 angegebenen Bedeutung steht und X für C-R³ mit den in Anspruch 1 oder 2 für R³ angegebenen Bedeutungen steht.
5. Pyrazolderivate gemäß Anspruch 1, worin X für N steht und Y ausgewählt ist unter S, SO, SO₂ oder N-R⁴.
6. Pyrazolderivate gemäß einem der Ansprüche 1 bis 5, worin Pz in Formel I für einen Rest der Formel IIa steht, worin R⁸ ausgewählt ist unter Hydroxy, OR¹¹ und OSO₂R¹² mit den für R¹¹ und R¹² in Anspruch 1 angegebenen Bedeutungen, wobei R⁹ und R¹⁰ die in Anspruch 1 angegebenen Bedeutungen haben.
7. Pyrazolderivate gemäß Anspruch 6, wobei in Formel IIa
 - R⁸ für Hydroxy, C₁-C₄-Alkyloxy, O-CH₂-Phenyl, Phenylcarbonyloxy, 2-, 3- oder 4-Fluorphenylcarbonyloxy, Cyclopropylcarbonyloxy, C₁-C₄-Sulfonyloxy, Phenylsulfonyloxy und 2-, 3- oder 4-Methylphenylsulfonyloxy;
 - R⁹ für C₁-C₄-Alkyl oder Cyclopropyl und
 - R¹⁰ für Wasserstoff oder C₁-C₄-Alkyl stehen.
8. Verfahren zur Herstellung von Verbindungen der Formel I mit R⁸ = Hydroxy, gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, daß man ein 5-Hydroxypyrazol der Formel III,

187

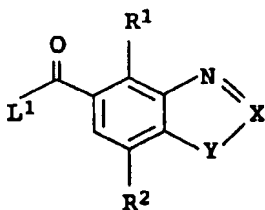


(III)

5

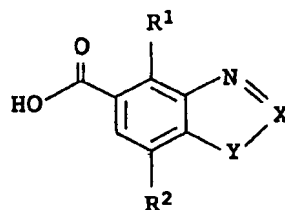
wobei die Variablen R^9 und R^{10} die in Anspruch 1 genannte Bedeutung haben, mit einer aktivierten Carbonsäure IVa oder einer Carbonsäure IVb

10



IVa

15



IVb

20

wobei die Variablen X , Y , R^1 und R^2 die unter Anspruch 1 genannte Bedeutung haben und L^1 für eine nukleophil verdrängbare Abgangsgruppe steht, acyliert und das Acylierungsprodukt gegebenenfalls in Gegenwart eines Katalysators zu den Verbindungen I mit $R^8 = \text{Hydroxy}$ umlagert.

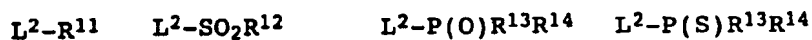
25

9. Verfahren zur Herstellung von Verbindungen der Formel I gemäß Anspruch 1 mit $R^8 = \text{Halogen}$, dadurch gekennzeichnet, dass man ein Pyrazol-Derivat der Formel I, mit $R^8 = \text{Hydroxy}$ mit einem Halogenierungsmittel umsetzt.

30

10. Verfahren zur Herstellung von Verbindungen der Formel I gemäß Anspruch 1 mit $R^8 = \text{OR}^{11}$, $\text{OSO}_2\text{R}^{12}$, $\text{OP}(\text{O})\text{R}^{13}\text{R}^{14}$ oder $\text{OP}(\text{S})\text{R}^{13}\text{R}^{14}$ dadurch gekennzeichnet, dass man ein Pyrazol-Derivat der Formel I mit $R^8 = \text{Hydroxy}$ mit einem Alkylierungsmittel Va , Sulfonylierungsmittel $\text{V}\beta$ oder Phosphonylierungsmittel $\text{V}\gamma$ bzw. $\text{V}\delta$,

35



40

IVa

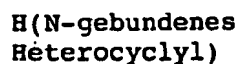
IV β IV γ IV δ

wobei die Variablen R^{11} bis R^{14} die in Anspruch 1 genannte Bedeutung haben und L^2 für eine nukleophil verdrängbare Abgangsgruppe steht, umgesetzt.

45

188

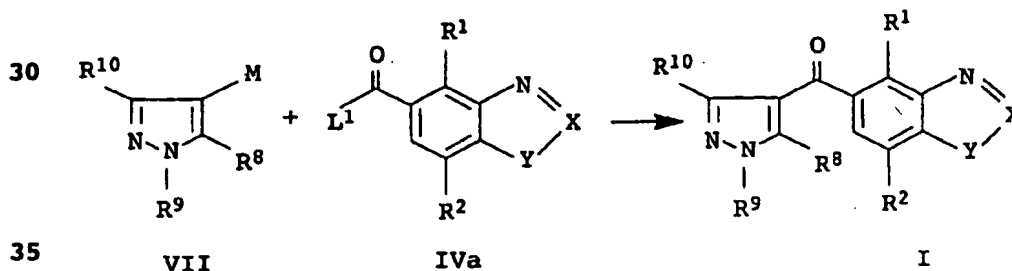
11. Verfahren zur Herstellung von Verbindungen der Formel I gemäß Anspruch 1 mit $R^8 = OR^{11}, SR^{11}, P(O)R^{13}R^{14}, NR^{15}R^{16}, ONR^{15}R^{16}$ oder N-gebundenes Heterocyclyl, dadurch gekennzeichnet, daß man ein Pyrazol-Derivat der Formel I mit $R^8 = \text{Halogen}$ oder OSO_2R^{12} mit einer Verbindung der Formel VI α , VI β , VI γ , VI δ , VI ϵ oder VI η



15

wobei die Variablen R^8, R^{11} bis R^{16} die in Anspruch 1 genannte Bedeutung haben, gegebenenfalls in Gegenwart einer Base, umgesetzt.

- 20 12. Verfahren zur Herstellung von Verbindungen der Formel I, worin $P_2 = \text{IIa}$ gemäß Anspruch 1 ist, dadurch gekennzeichnet, dass man ein metalliertes Pyrazol-Derivat der Formel VII, worin M für ein Metall steht und R^8 bis R^{10} die in Anspruch 1 genannte Bedeutung haben, mit einem Carbonsäure-Derivat der Formel IVa, worin R^1, R^2, X und Y die in Anspruch 1 genannte Bedeutung haben und L^1 für eine nucleophil verdrängbare Abgangsgruppe steht, umsetzt.



13. Mittel, enthaltend mindestens ein Pyrazol-Derivat der Formel I oder ein landwirtschaftlich brauchbares Salz von I gemäß einem der Ansprüche 1 bis 7, und übliche Hilfsmittel.
- 40
14. Verfahren zur Bekämpfung von unerwünschtem Pflanzenwuchs, dadurch gekennzeichnet, daß man eine herbizid wirksame Menge mindestens eines Pyrazol-Derivates der Formel I oder eines landwirtschaftlich brauchbaren Salzes von I gemäß einem der Ansprüche 1 bis 7, auf Pflanzen, deren Lebensraum und/oder auf Samen einwirken läßt.
- 45

189

15. Verwendung von Pyrazol-Derivaten der Formel I oder deren landwirtschaftlich brauchbaren Salzen gemäß einem der Ansprüche 1 bis 7 als Herbizide.

5

10

15

20

25

30

35

40

45

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

National Application No

PCT/EP 00/04040

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

IPC 7 C07D417/06 C07D403/06 C07D413/06 A01N43/76 A01N43/78
A01N43/828 A01N43/647

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

IPC 7 C07D A01N

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practical, search terms used)

EPO-Internal

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category *	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO 97 08164 A (DU PONT ;GEE STEPHEN KENNETH (US); HANAGAN MARY ANN (US); HONG WON) 6 March 1997 (1997-03-06) cited in the application claims 1,5	1,15
A	EP 0 822 187 A (NISSAN CHEMICAL IND LTD) 4 February 1998 (1998-02-04) cited in the application claims 1,14	1,15
A	WO 96 05197 A (BASF AG ;PLATH PETER (DE); DEYN WOLFGANG VON (DE); ENGEL STEFAN (D) 22 February 1996 (1996-02-22) cited in the application claim 1	1,15
	--- -/--	



Further documents are listed in the continuation of box C.



Patent family members are listed in annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier document but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art.

"G" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

9 August 2000

Date of mailing of the international search report

18/08/2000

Name and mailing address of the ISA

European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2
NL - 2280 HV Rijswijk
Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl,
Fax: (+31-70) 340-3016

Authorized officer

De Jong, B

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No

PCT/EP 00/04040

C.(Continuation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category *	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO 97 09327 A (BASF AG ; OTTEN MARTINA (DE); DEYN WOLFGANG VON (DE); ENGEL STEFAN) 13 March 1997 (1997-03-13) cited in the application abstract; claim 1 -----	1, 15

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International Application No

PCT/EP 00/04040

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
WO 9708164 A	06-03-1997	AU 6777896 A	19-03-1997
		EP 0846112 A	10-06-1998
EP 0822187 A	04-02-1998	AU 4632696 A	27-08-1996
		US 5939559 A	17-08-1999
		WO 9624589 A	15-08-1996
		US 6030926 A	29-02-2000
WO 9605197 A	22-02-1996	DE 4427997 A	15-02-1996
		AU 3166695 A	07-03-1996
		BR 9508553 A	11-11-1997
		CA 2197118 A	22-02-1996
		CN 1157616 A	20-08-1997
		EP 0775136 A	28-05-1997
		HU 77177 A,B	02-03-1998
		JP 10506618 T	30-06-1998
		US 5723415 A	03-03-1998
WO 9709327 A	13-03-1997	DE 19532312 A	06-03-1997
		AU 710278 B	16-09-1999
		AU 6929696 A	27-03-1997
		BR 9610210 A	02-02-1999
		CA 2227946 A	13-03-1997
		CZ 9800602 A	12-08-1998
		EP 0961774 A	08-12-1999
		HU 9802345 A	28-01-1999
		JP 11512105 T	19-10-1999
		PL 325279 A	20-07-1998
		SK 24498 A	04-11-1998

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

nationales Aktenzeichen

PCT/EP 00/04040

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES

IPK 7 C07D417/06 C07D403/06 C07D413/06 A01N43/76 A01N43/78
A01N43/828 A01N43/647

Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPK) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPK

B. RECHERCHIERTE GEBIETE

Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)

IPK 7 C07D A01N

Recherchierte aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen

Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe)

EPO-Internal

C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
A	WO 97 08164 A (DU PONT ;GEE STEPHEN KENNETH (US); HANAGAN MARY ANN (US); HONG WON) 6. März 1997 (1997-03-06) in der Anmeldung erwähnt Ansprüche 1,5	1,15
A	EP 0 822 187 A (NISSAN CHEMICAL IND LTD) 4. Februar 1998 (1998-02-04) in der Anmeldung erwähnt Ansprüche 1,14	1,15
A	WO 96 05197 A (BASF AG ;PLATH PETER (DE); DEYN WOLFGANG VON (DE); ENGEL STEFAN (D) 22. Februar 1996 (1996-02-22) in der Anmeldung erwähnt Anspruch 1	1,15

☒ Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen

☒ Siehe Anhang Patentfamilie

* Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen :

"A" Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist

"E" älteres Dokument, das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist

"L" Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt)

"O" Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht

"P" Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist

"T" Spätere Veröffentlichung, die nach dem internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist

"X" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden

"Y" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren anderen Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist

"Z" Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist

Datum des Abschlusses der internationalen Recherche

9. August 2000

Absenddatum des internationalen Recherchenberichts

18/08/2000

Name und Postanschrift der internationalen Recherchenbehörde
Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentaan 2
NL - 2280 HV Rijswijk
Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl,
Fax: (+31-70) 340-3016

Bevollmächtigter Bediensteter

De Jong, B

C.(Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
A	WO 97 09327 A (BASF AG ; OTTEN MARTINA (DE); DEYN WOLFGANG VON (DE); ENGEL STEFAN) 13. März 1997 (1997-03-13) in der Anmeldung erwähnt Zusammenfassung; Anspruch 1 -----	1,15

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP 00/04040

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
WO 9708164 A	06-03-1997	AU 6777896 A EP 0846112 A	19-03-1997 10-06-1998
EP 0822187 A	04-02-1998	AU 4632696 A US 5939559 A WO 9624589 A US 6030926 A	27-08-1996 17-08-1999 15-08-1996 29-02-2000
WO 9605197 A	22-02-1996	DE 4427997 A AU 3166695 A BR 9508553 A CA 2197118 A CN 1157616 A EP 0775136 A HU 77177 A,B JP 10506618 T US 5723415 A	15-02-1996 07-03-1996 11-11-1997 22-02-1996 20-08-1997 28-05-1997 02-03-1998 30-06-1998 03-03-1998
WO 9709327 A	13-03-1997	DE 19532312 A AU 710278 B AU 6929696 A BR 9610210 A CA 2227946 A CZ 9800602 A EP 0961774 A HU 9802345 A JP 11512105 T PL 325279 A SK 24498 A	06-03-1997 16-09-1999 27-03-1997 02-02-1999 13-03-1997 12-08-1998 08-12-1999 28-01-1999 19-10-1999 20-07-1998 04-11-1998

**This Page is Inserted by IFW Indexing and Scanning
Operations and is not part of the Official Record**

BEST AVAILABLE IMAGES

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images include but are not limited to the items checked:

- ☐ **BLACK BORDERS**
- ☐ **IMAGE CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES**
- ☐ **FADED TEXT OR DRAWING**
- ☐ **BLURRED OR ILLEGIBLE TEXT OR DRAWING**
- ☐ **SKEWED/SLANTED IMAGES**
- ☐ **COLOR OR BLACK AND WHITE PHOTOGRAPHS**
- ☐ **GRAY SCALE DOCUMENTS**
- ☒ **LINES OR MARKS ON ORIGINAL DOCUMENT**
- ☐ **REFERENCE(S) OR EXHIBIT(S) SUBMITTED ARE POOR QUALITY**
- ☐ **OTHER:**

IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.

As rescanning these documents will not correct the image problems checked, please do not report these problems to the IFW Image Problem Mailbox.